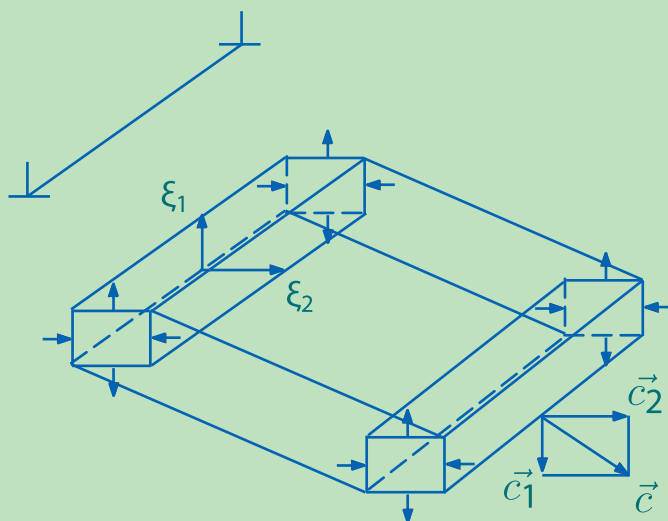


ВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ РОСТА МАРТЕНСИТА ПРИ $\gamma \rightarrow \alpha$ ПРЕВРАЩЕНИИ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА



Электронный архив УГЛТУ

М. П. Кащенко

**ВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ РОСТА
МАРТЕНСИТА ПРИ $\gamma - \alpha$
ПРЕВРАЩЕНИИ
В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА**

Издание второе, исправленное и дополненное



Москва ♦ Ижевск

2010

УДК 34.2
ББК 669.017
К317

Кащенко М. П.

Волновая модель роста мартенсита при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах на основе железа. — Изд. 2-е, испр. и дополн. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. — 280 с.

В монографии излагается оригинальная модель, описывающая рост отдельного кристалла α -мартенсита, как процесс самоорганизации, протекающий в существенно неравновесных условиях и управляемый квазипродольными волнами смещений. Анализируются условия, необходимые для реализации механизма генерации управляющих волн неравновесными d-электронами. Обсуждается широкий круг вопросов, связанный с физической интерпретацией наблюдаемых особенностей $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в сплавах железа, включая процесс зарождения мартенсита.

Эпилог, добавленный во втором издании монографии, имеет самостоятельное значение, так как дает сжатый обзор достижений динамической теории за период с 1993 по 2009 гг., позволяющий утверждать, что в целом завершено построение теории, объясняющей все основные особенности $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения, наблюдаемые в сплавах железа при размерах зерна выше критических.

Для специалистов в области физики твердого тела и металлофизики, а также аспирантов и студентов вузов.

ISBN 978-5-93972-830-0

ББК 669.017

© М. П. Кащенко, 2010

<http://shop.rcd.ru>
<http://ics.org.ru>

Оглавление

Список сокращений	6
Предисловие	7
Введение	11
1 Основные представления о $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении в сплавах на основе железа	16
1.1 Место $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения среди других структурных превращений в твердых телах	16
1.2 Характерные признаки самопроизвольного $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения	19
1.3 Устойчивость решетки вблизи температуры M_S . Проблема зародышеобразования при $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении . . .	25
1.4 Успехи и трудности теоретического описания $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения	32
1.5 Физическая постановка задачи	46
2 Особенности зонного спектра электронов, необходимые для реализации фононного лазера	57
2.1 Гамильтониан задачи	57
2.2 Вид неравновесной добавки к электронной функции распределения. Точки, разделяющие инверсно населенные состояния одномерного электронного спектра	58
2.3 Поверхности, разделяющие инверсно населенные состояния трехмерного электронного спектра	60
2.4 Ограничения, налагаемые соотношениями эквидистантности . .	69
2.5 Потенциально активные пары электронных состояний в спектре ГЦК-модификации железа	75
2.6 Заключение к главе 2	88
3 Уравнения для системы взаимодействующих электронов и фононов. Пороговые условия генерации волн	91
3.1 Пороговые условия для одномодовой генерации	92

3.2	Пороговые условия двух- и трехмодовой генерации. Характер фазовых переходов для поля излучения	100
3.3	Амплитуды генерируемых волн и деформация, обусловленная волнами	108
3.4	Заключение к главе 3	113
4	Согласование концентрационной зависимости температуры γ–α мартенситного превращения и оптимальной температуры генерации в сплавах на основе железа	118
4.1	Постановка задачи	118
4.2	Модифицированное распределение электронов и его производные в случае прямоугольной формы спектральной плотности . .	121
4.3	Область значений T' , Γ' , оптимальных для генерации фононов, в случае лоренцевой формы спектральной плотности	129
4.4	Отображение зависимостей $M_S(C)$ в область значений T' , Γ' , оптимальных для генерации фононов, и анализ электронных конфигураций атомов в бинарных сплавах замещения	133
4.5	Обсуждение результатов для сплавов замещения	140
4.5.1	Выбор значения a_0 и электронных конфигураций атомов на основе данных о электрических и оптических свойствах компонентов сплава	141
4.5.2	Влияние изменения параметра решетки и ширины s-зоны на разность зарядовых чисел ΔZ компонентов сплава . .	146
4.5.3	Оценка разности химических потенциалов γ - и α -фаз для подсистемы d-электронов	154
4.6	Зависимость $M_S(C)$ для сталей и степень ионизации атомов углерода	154
4.7	Заключение к главе 4	158
5	Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита в модели фононного лазера	163
5.1	Габитусы кристаллов в сплавах Fe - Ni, Fe - C	164
5.1.1	Сопоставление плоскости с парой волн	164
5.1.2	Габитус (225)	165
5.1.3	Габитус (557). Критерий смены габитуса (557) на (225) .	168
5.1.4	Габитусы $\{15\ 3\ 10\} \div \{9\ 2\ 5\}$	170
5.2	Закономерность группировки кристаллов пакетного мартенсита .	172
5.3	Влияние магнитного состояния аустенита и внешнего магнитного поля на γ – α мартенситное превращение	177
5.3.1	Возможные причины смены габитусных плоскостей . . .	177

5.3.2	Модель с одним пиком плотности электронных состояний. Обменное расщепление и перераспределение электронов	181
5.3.3	Ориентированный рост кристаллов атермического мартенсита во внешнем магнитном поле	188
5.4	Заключение к главе 5	194
6	Волновая модель движения границы кристалла мартенсита	199
6.1	Согласованное распространение волны смещения с волной переключения температуры или химического потенциала	200
6.2	Согласованное распространение пары волн смещений с $T(\mu)$ - волной переключения	204
6.3	Стационарная волна относительной объемной деформации $\tilde{\epsilon}$ при $\gamma - \alpha$ превращении	208
6.3.1	Триггерная $\tilde{\epsilon}$ -волна переключения при отсутствии волн смещений	208
6.3.2	Влияние волн смещения на скорость $\tilde{\epsilon}$ - волны переключения	213
6.3.3	Профиль модифицированной $\tilde{\epsilon}$ -волны переключения . . .	214
6.4	Заключение к главе 6	219
	Заключение	225
	Литература	236
	Эпилог	262
	Summary	279

Список сокращений

МП	– мартенситное превращение
СП	– структурное превращение
ГЦК	– гранецентрированная кубическая
ОЦК	– объемноцентрированная кубическая
ОЦТ	– объемноцентрированная тетрагональная
ГПУ	– гексагональная плотноупакованная
ОБПС	– область ближнего порядка смещений
ДИР	– деформация при инвариантной решетке
ЯГР	– ядерный гамма-резонанс
ПЗБ	– первая зона Бриллюэна
ЭС	– электронные состояния
ИН	– инверсия населенностей
ИРН	– инверсная разность населенностей
ФВП	– фазовая волна переключения
ТВП	– триггерная волна переключения
ЦЗ	– центр зарождения
УВП	– управляющий волновой процесс
СИП	– слабоискаженная поверхность (плоскость)

Предисловие

Проблемой построения физической модели $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения автор начал заниматься в 1974 году. Выполненный анализ имеющейся литературы позволил сразу сделать три вывода:

- превращение носит кооперативный характер и протекает в существенно неравновесных условиях;
- скорость роста кристаллов α -мартенсита настолько велика, что единственной моделью, имеющей отношение к процессу быстрого управляемого роста, может быть лишь волновая модель;
- микроскопическая теория превращения отсутствует.

Основную роль в создании модели роста отдельного мартенситного кристалла сыграли, с одной стороны, понимание того, что часть выделяемой в ходе превращения энергии может быть трансформирована в энергию волн смещений атомов, благодаря генерации волн неравновесными 3d-электронами, и, с другой стороны, формулировка простой двухволновой схемы управления ростом кристалла. Несмотря на то, что оба этих положения были ясны автору уже в 1976 году, потребовалось немало усилий для обоснования механизма генерации волн, непротиворечивой трактовки совокупности наблюдаемых морфологических и кинетических особенностей превращения в сплавах с широкой областью изменения концентрации второго компонента, а также экспериментальной проверки ряда предсказаний теории. Представленный в монографии материал в основном близок к содержанию докторской диссертации, завершенной в 1985 году.

Первому изданию монографии в 1993 г. способствовали, с одной стороны, пожелания, накапливавшиеся в ходе многочисленных обсуждений со специалистами в областях физики твердого тела и фазовых переходов, физического металловедения и материаловедения, а с другой стороны, достигнутый успех в реализации теоретической и экспериментальной программ исследования стадии зарождения α -мартенсита, базирующихся на выводах волновой модели роста. Решение переиздать монографию обусловлено, во-первых, тем, что результаты целиком сохраняют свою актуальность, поскольку лежат в основе механизма управления ростом отдельного мартенситного кристалла. Степень полноты описания наблюдаемых особенностей мартенситного превращения, достигнутая в настоящее время в рамках концепции волнового механизма управления ростом кристалла, подтверждает его адекватность реальности. Поэтому автор посчитал целесообразным новым изданием еще раз привлечь внимание научного сообщества к предлагаемому решению одной из интереснейших проблем фазовых переходов в твердых телах. Во-вторых, первое издание монографии стало труднодоступным для нового поколения исследователей. И, наконец, для отражения результатов, полученных в рамках динамического подхода в 1994-2009 гг., второе издание дополнено кратким эпилогом. Полученные после 1985 г. результаты заслуживают отдельного монографического изложения. Однако и краткий их обзор в заключительной части монографии, полезен для формирования полной картины превращения. Ограничимся здесь лишь констатацией важнейших из них:

- установлено, что роль дислокационных центров зарождения кристаллов α -мартенсита с габитусами $\{557\}$ - $\{225\}$ и $\{3\ 10\ 15\}$ - $\{259\}$ играют смешанные 60° и 30° прямолинейные дислокации аустенита с линиями $\Lambda \parallel \langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ соответственно (или аналогичные участки дислокационных петель);
- проведено физическое моделирование возбужденного состояния решетки, типичного для стадии зарождения и воспроизводимого в области фронта волны превращения, с помощью

воздействия на поверхность монокристалла Fe - 31,5 Ni излучения пикосекундного лазера. Эти результаты можно рассматривать как подтверждающие и уточняющие качественную модель зарождения, принятую при построении модели роста;

- разработана динамическая теория формирования двойникованных мартенситных кристаллов;
- для ОЦК-ГПУ превращения динамическая модель роста мартенситного кристалла позволила описать все наблюдаемые макроскопические морфологические признаки;
- установлено соотношение пространственных масштабов, характерное для зарождения мартенситного кристалла в упругом поле отдельной дислокации: $d \sim 10^{-2}D$, где d - поперечный размер начального возбужденного состояния решетки в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда, а D - диаметр зерна;
- в случае переходных металлов и сплавов на их основе при условии, что часть термодинамической движущей силы трансформируется неравновесными электронами в энергию управляющих волн смещений атомов, решена проблема критического размера D_c зерна при реконструктивных мартенситных превращениях;
- сформулирована кристонная модель для описания процесса формирования полос сдвига и кристаллов мартенсита деформации.

В настоящее время можно утверждать о становлении динамической теории реконструктивных мартенситных превращений для переходных металлов и сплавов на их основе. Пример $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения показывает, что ключом к пониманию процессов, управляющих ростом новой фазы при реконструктивных кооперативных перестройках, является расшифровка динамической структуры возбужденного состояния решетки в неравновес-

ной области фронта нелинейной волны превращения. Данный вывод играет значительную роль, так как составляет суть парадигмы, дополнительной к традиционной для равновесной термодинамики концептуальной схеме.

Для теории фазовых превращений рассматриваемый вариант мартенситного превращения принципиально важен, поскольку соответствует предельному случаю ярко выраженных кооперативных переходов I-го рода, протекающих с предельно высокими (сверхзвуковыми) скоростями в условиях сильно локализованной деформации. Ясно, что этот тип превращения резко контрастирует с другим предельным случаем мягкомодовых переходов II-го рода. Развитые представления могут оказаться весьма полезными и при описании мартенситных превращений I-го рода, близких к превращениям II-го рода, реализуемым, например, в ряде сплавов с эффектом памяти формы.

Автор надеется, что монография окажется полезной широкому кругу исследователей, поскольку в заметной мере восполняет пробел в теории реконструктивных мартенситных превращений.

Автор признателен коллегам по работе и всем специалистам, дискуссии с которыми способствовали прогрессу исследований.

Введение

Стали и сплавы на основе железа широко применяются в промышленности и поэтому являются предметом многочисленных экспериментальных исследований, нацеленных в конечном итоге на создание материалов с заданным комплексом механических свойств. Традиционными методами решения этой задачи являются легирование и термомеханическая обработка, сопровождающаяся, как правило, фазовыми (структурными) превращениями, среди которых важную роль играет $\gamma - \alpha$ мартенситное превращение (МП), реализующееся в процессе охлаждения путем бездиффузионной перестройки гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки высокотемпературной γ - фазы (аустенита) в объемноцентрированную кубическую (ОЦК) или тетрагональную (ОЦТ) решетку низкотемпературной α - фазы (мартенсита). Изучение именно этого превращения в значительной мере способствовало осознанию специфики бездиффузионных структурных переходов, характеризующихся кооперативностью смещений атомов.

Выявление динамических механизмов, объясняющих особенности протекания мартенситных превращений, вскрывающих их физическую природу, можно отнести к разряду фундаментальных проблем физики твердого тела. В настоящее время динамический подход получил относительное развитие лишь для превращений дисторсионного типа, при которых группы симметрии решеток конечной и исходной фаз связаны отношением соподчинения. Эти превращения в принципе могут протекать как фазовые переходы второго рода (обычно имеют лишь слабо выраженные признаки перехода первого рода) и находят разумную трактовку в теории „мягкой“ моды. Напротив, реконструктивные фазовые переходы, к

которым относится $\gamma - \alpha$ МП, протекают с ярко выраженными свойствами переходов первого рода (значительный температурный гистерезис между прямым и обратным превращением, тепловой и объемный эффекты), и к ним теория „мягкой“ моды непосредственно неприменима.

Теоретические исследования $\gamma - \alpha$ МП характеризуются параллельным развитием кристаллогеометрического, термодинамического и волнового подходов. Причем немногочисленные попытки введения схем волнового описания роста мартенсита из-за отсутствия понимания механизма возбуждения и стабилизации волн, их типа, направлений распространения были неинформативными и оставались в тени впечатляющих успехов интерпретации морфологии продукта превращения, достигнутых при использовании двух первых подходов. В то же время ясно, что лишь волновой подход может претендовать на описание динамической картины превращения. Это обстоятельство и определяет актуальность развития волновых моделей роста кристаллов мартенсита.

Центральными при построении волновой картины роста α -фазы являются вопросы о механизме подкачки энергии для поддержания стационарного волнового режима и типе волнового процесса. Как следует из экспериментальных данных, скорость торцевого роста кристаллов мартенсита слабо зависит от температуры и имеет тот же порядок величины $\sim 10^3$ м/с, что и скорость звука, и, вероятно, превышает скорость распространения продольных упругих волн. Сверхзвуковая скорость роста указывает, с одной стороны, на сложный нелинейный характер волнового процесса, а с другой стороны, на его адиабатичность, что, в сочетании с переохлаждением $\Delta T \approx 200$ К ниже температуры T_0 равновесия фаз, значительными тепловыми и объемными эффектами превращения, должно приводить к большим градиентам температуры и химического потенциала электронов в межфазной области, а значит, к появлению интенсивных электронных потоков. Поскольку, в соответствии с общеизвестными положениями неравновесной термодинамики, в сильно неравновесной системе возможно явление самоорганизации, сводящееся в случае взаимодействия поля излучения с инверсно за-

селенной излучающей подсистемой к генерации когерентных волн, необходимо исследовать динамику неравновесной системы взаимодействующих электронов и фононов с целью установления (на микроскопическом уровне описания) механизма управления кооперативным смещением атомов. Конкретное для $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в сплавах на основе железа направление исследований, открываемое данной работой, можно сформулировать следующим образом:

теоретическое описание роста мартенсита как процесса самоорганизации, связанного с распространением в решетке волн смещений, генерируемых (или усиливаемых) неравновесными 3d-электронами.

Главная цель работы состоит в построении такой волновой модели роста мартенсита, которая в принципе позволяла бы установить связь между микроскопическими (особенности строения зонного спектра электронов) и макроскопическими (морфологические признаки) характеристиками превращающейся системы. Достижение этой цели потребовало:

1. разработки методики поиска в зонном спектре электронов пар электронных состояний, потенциально активных в генерации волн смещений, и оценки числа таких пар для электронного спектра железа с ГЦК решеткой;
2. установления пороговых условий генерации упругих волн смещений неравновесными электронами и оценки максимальных значений амплитуд (деформаций), достигаемых в волнах смещений;
3. обоснования возможности реализации условий, необходимых для генерации волн в широкой области изменения температуры и концентрации второго компонента сплавов на основе железа;
4. построения модели, связывающей ряд морфологических признаков с согласованным распространением комбинаций волн смещений;

5. рассмотрения движения границы мартенситного кристалла в модели совместно распространяющихся волны переключения для относительной объемной деформации и волн смещений, обеспечивающих достижение пороговой деформации.

Полученная в результате проведенных теоретических исследований качественная картина стадии быстрого торцевого роста кристаллов мартенсита, управляемого бегущими квазипродольными волнами смещений, высокий уровень амплитуд которых поддерживается за счет процессов индуцированного излучения неравновесными 3d-электронами фононов, вскрывает физическую природу процессов, определяющих конкретный путь мартенситной реакции, и устанавливает пространственно-временные масштабы, значения градиентов температуры и химического потенциала электронов (а значит, напряженность электрического поля и плотность электрического тока), характерные для межфазной неравновесной области при самопроизвольном росте кристалла.

Информация о физических полях (смещений, температуры, электрическом и магнитном) в неравновесной области вблизи растущего кристалла принципиально важна для постановки экспериментов, моделирующих процесс образования зародыша α -фазы, а также для реализации экспериментальных исследований, отличительной чертой которых является динамическое направленное воздействие с использованием гиперзвукового диапазона частот $\sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$, совпадающего с диапазоном частот волн смещений, управляющих ростом кристалла. Богатые возможности для направленного формирования структуры при $\gamma - \alpha$ превращении в монокристаллах аустенита заключены в комбинированном воздействии гиперзвука, внешних механических напряжений и сильных магнитных полей. В частности, предсказанный автором эффект ориентированного роста мартенсита в сильном магнитном поле обнаружен в результате экспериментальных исследований, выполненных в Институте физики металлов УрО РАН.

В первой главе монографии проводится краткий обзор основных теоретических и экспериментальных исследований $\gamma - \alpha$ мартен-

ситного превращения, отмечаются трудности, стоящие перед теорией (в частности, слабости работ, использующих волновой подход) при описании стадий зарождения и быстрого роста кристаллов мартенсита, и дается развернутая физическая постановка задачи. Содержание глав 2-6, имеющих полностью оригинальный характер, в концентрированной форме отражают соответственно пункты 1-5, приведенные выше при формулировке цели работы. В Заключение приводятся выводы, играющие принципиально важную роль для понимания динамического механизма $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения, дается краткий обзор результатов, относящихся к описанию стадии зарождения мартенсита и обсуждаются перспективы дальнейших исследований. В Эпilogue кратко освещаются достижения динамической теории, полученные автором и его коллегами в 1995-2009 гг.

Обязательным для понимания содержания монографии является знакомство с главой 1. Порядок дальнейшего чтения имеет несколько вариантов. Так, например, интересующиеся только трактовкой морфологии продуктов $\gamma - \alpha$ МП могут сразу перейти к главе 5. Специалисты по фазовым диаграммам и электронному строению сплавов получают новую для себя информацию из главы 4, касающуюся вопроса об оптимальной, с позиций теории роста, концентрационной зависимости температуры начала $\gamma - \alpha$ МП. Материал главы 2 представляет самостоятельный интерес для исследователей, занимающихся кинетическими явлениями в переходных металлах. Тем не менее, желающим разобраться в таком сложном процессе как $\gamma - \alpha$ МП автор рекомендует последовательное чтение монографии.

Глава 1

Основные представления о $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении в сплавах на основе железа

1.1 Место $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения среди других структурных превращений в твердых телах

Положение о связи структуры с физическими свойствами твердых тел является одним из основополагающих в физике твердого тела и определяет неизменный интерес к исследованиям структурных превращений (СП). С позиций теории симметрии выделяются два типа СП [1]. К первому типу (СП I) относятся переходы, в которых пространственная группа одной из фаз (как правило, низкотемпературной) является подгруппой группы симметрии исходной фазы. СП I называют дисторсионными переходами. Успехи динамической теории при описании СП I связаны в основном с концепцией мягкой фононной моды; согласно этой концепции частоты некоторых фононов, вследствие определенных взаимодействий в системе, приобретают сильную температурную зависимость и могут приближаться к нулю при стремлении температуры T к T_C . В критической точке T_C появляется макроскопическое число квантов с нулевой частотой, и соответствующие статические смещения атомов наглядно интерпретируются в картине „вмороженной“ в

исходный кристалл мягкой моды. Такой подход к СП I в настоящее время является достаточно хорошо разработанным и подробно освещен в литературе (см., например, [1–4]). Поэтому, не останавливаясь ни на конкретных примерах СП I, ни на механизмах смягчения мод, отметим лишь, что подобные переходы протекают либо как переходы второго рода, либо как переходы первого рода близкие ко второму.

При переходах второго типа (СП II) симметрии исходной и конечной фаз не связаны отношением соподчинения. К ним относятся, например, превращения из гранецентрированной кубической (ГЦК) в объемноцентрированную кубическую (ОЦК) или в гексагональную плотноупакованную (ГПУ) фазы. СП II протекают с ярко выраженными признаками переходов первого рода: значительный тепловой эффект и температурный гистерезис между прямым (при охлаждении) и обратным (при нагреве) превращениями. Этот тип превращения называют реконструктивным.

В отдельный класс (СП III) выделяются СП типа порядок-беспорядок, в которых при температурах ниже температуры перехода T_C атомы занимают преимущественно одно из квазиравновесных положений, тогда как выше T_C заполнение различных (не менее двух) положений было равновероятно. Помимо [1–4] обстоятельный обзор этих СП дан в [5].

Наконец, к четвертому типу СП IV можно отнести переходы „симметричная-несоразмерная-соразмерная фаза“, в которых промежуточная несоразмерная фаза обладает сверхструктурой, характеризуемой периодом, несоизмеримым с исходным периодом симметричной фазы [1, 4, 6].

В настоящее время для структурных превращений, протекающих бездиффузионно, путем кооперативной перестройки решетки, используется термин мартенситные превращения (МП). При таком широком определении к МП можно отнести СП I, СП II, СП IV, исключая СП III, для которых перескоки атомов на расстояния порядка межатомных являются необходимым условием реализации превращения. Необходимо отметить, что первоначально термин „мартенсит“ употреблялся для обозначения пластинча-

той составляющей микроструктуры закаленной стали [7]. Если в основу определения МП положить совокупность признаков превращения в стали, рассматриваемую ниже, то термин МП следует использовать в более узком смысле лишь для части бездиффузионных превращений типа СП II. На необходимость уточнения терминологии обращалось внимание в работах [8, 9]. Причины неудовлетворенности существующей классификацией связаны как с ее незавершенностью, так и с различием микроскопических механизмов структурных превращений разного типа, выявление которых требует максимальной дифференцировки мартенситных превращений. Наоборот, при кристаллогеометрическом или термодинамическом описании вполне естественно стремление к единой трактовке как можно более широкого класса мартенситных превращений.

При классификации фазовых превращений по кинетическим признакам [10, 11] среди бездиффузионных СП, скорость протекания которых определяется скоростью перемещения границы фаз, мартенситные превращения естественно выделяются кооперативным характером перестройки решетки, большой (порядка скорости звука) скоростью роста, практически не зависящей от температуры. Альтернативным набором признаков характеризуется „нормальное“ полиморфное превращение (нескоррелированные атомные перемещения через межфазную границу, относительно медленное и термически активируемое движение границы фаз).

В отсутствие единой установившейся классификации существующие подходы, акцентирующие внимание на различных признаках СП, естественно рассматривать как дополнительные друг к другу.

Основное внимание в данном теоретическом исследовании будет уделено $\gamma - \alpha$ (ГЦК-ОЦК или ОЦТ) мартенситному превращению в сталях и сплавах на основе железа, то есть в дальнейшем, если не сделано специальной оговорки, термин мартенситное превращение будет использоваться в его узком смысле. Выбор $\gamma - \alpha$ МП в качестве объекта исследования, помимо его практической важности, обусловлен тем, что для этого превращения накоплен наибольший объем экспериментальной информации. Хорошо развитые в

настоящее время кристаллогеометрический и термодинамический подходы не могут дать исчерпывающей картины превращения и должны быть дополнены микроскопическим описанием, которое позволило бы построить динамическую модель $\gamma - \alpha$ МП. Разумеется, цель настоящей работы скромнее, чем построение полной микроскопической теории $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения, и мы сформулируем их после краткого обзора существующих представлений о МП в сталях и сплавах на основе железа.

1.2 Характерные признаки самопроизвольного $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения

Существует достаточно много монографий [10–16] и обзоров (см., например, [7, 17–19]), в которых освещены как ретроспектива исследований, так и основные черты $\gamma - \alpha$ превращения. Поэтому нет необходимости вести изложение в исторической последовательности, заметим лишь, что начало количественным исследованиям $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения положено в двадцатых годах XX века, а именно рентгенографически было установлено [20], что низкотемпературная фаза (мартенсит) в стали имеет объемноцентрированную тетрагональную (ОЦТ) кристаллическую решетку, в то время как исходная высокотемпературная фаза (аустенит) имеет ГЦК решетку. ОЦТ решетка типична для сплавов внедрения (Fe - C, Fe - N), причем величина тетрагональности растет с концентрацией внедренного компонента, тогда как для сплавов замещения (Fe - Ni, Fe - Mn) более характерна ОЦК решетка. Для обоих типов сплавов мартенситное превращение обладает сходными признаками, при перечислении которых в основном будем следовать [13], используя для количественной иллюстрации системы Fe - C, Fe - Ni.

Определение Г.В.Курдюмовым механизма мартенситного превращения как закономерного скачкообразного процесса перестройки решетки, при котором относительные перемещения соседних атомов не превышают межатомных расстояний, позволило рас-

смаатривать МП как фазовый переход без изменения состава, подобный фазовым переходам в однокомпонентных системах. Для переходов I рода, как известно [21], температура равновесия фаз T_0 определяется равенством свободных энергий Гельмгольца F : $F_\gamma(T_0) = F_\alpha(T_0)$, а необходимость затрат энергии на создание границы раздела фаз приводит к явлениям переохлаждения ниже T_0 в случае прямого (перегрева выше T_0 для обратного) превращения. Обозначим M_S и A_S температуры начала прямого $\gamma - \alpha$ и обратного $\alpha - \gamma$ мартенситных превращений соответственно. Типичные значения температурного гистерезиса велики и достигают $(M_S - A_S) \simeq 400$ К, значит велики и величины переохлаждения (перегрева): $T_0 - M_S \approx A_S - T_0 \approx 200$ К. Существенным является и объемный эффект, оцениваемый разными авторами в пределах 2-5%, причем удельный (на единицу массы) объем α -фазы больше. Удельный тепловой эффект [22] достигает сотен калорий на моль, вызывая при прямом мартенситном превращении разогрев образца на десятки градусов [23].

Перечислим теперь характерные структурные (морфологические) признаки $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения.

1. Мартенсит возникает в форме пластин с малым отношением толщины к другим линейным размерам либо в виде линзовидных кристаллов, в центральной части которых (мидрибе) хорошо выделена пластина, возникающая на первом этапе МП. Толщина пластин колеблется в пределах $10^{-7} - 10^{-6}$ м (от 0,1 до нескольких микрон).
2. Габитусная плоскость пластины (граница раздела фаз или плоские границы мидриба) имеет несколько (в зависимости от состава) устойчивых ориентировок относительно кристаллографических осей γ и α -фаз. В системах Fe-C, Fe-Ni наблюдаются габитусные плоскости, близкие к $\{557\} \div \{111\}$ (до 0,6 вес.% C, до 29% Ni.), $\{225\}$ - (0,6 \div 1,4 вес.% C), $\{259\} \div \{31015\}$ - (1,4 \div 1,8 вес.% C, 29 - 34% Ni).¹

¹Всюду ниже кристаллографические обозначения без указания базиса даны в осях исходной γ -фазы (правая тройка векторов вдоль осей симметрии четвертого порядка $\langle 001 \rangle$).

3. Форма превращенной области изменяется, создавая рельеф на поверхности металла. Изменение формы характеризуют параметрами макроскопического сдвига. Наличие этого признака привело к тому, что термин сдвиговое превращение во многих случаях рассматривают как синоним МП.
4. Между решетками γ и α - фаз имеется ориентационное соотношение, указывающее параллельность (или приблизительную параллельность) плотноупакованных плоскостей фаз: $\{111\}_{\gamma} \parallel \{110\}_{\alpha}$ и углы разориентации между плотноупакованными направлениями в параллельных плоскостях.
5. Кристаллы мартенсита обладают закономерной внутренней структурой и обнаруживают во многих случаях упорядоченность взаимного расположения. Так, кристаллы с габитусами $\{557\} \div \{111\}$ характеризуются сложной дислокационной структурой и образуют колонии (пакеты) примерно однонаправленных кристаллов, тогда как для кристаллов с габитусами $\{225\}$, $\{259\} \div \{31015\}$ типичным является образование внутренних двойников превращения и иные группировки кристаллов (см. подробнее [24]).

В качестве важного итога, подчеркнутого в [16], отметим, что „... для отдельного мартенситного кристалла габитусная плоскость, конкретный вариант ориентационного соотношения и параметры макроскопического сдвига связаны однозначно, т.е. данной плоскости габитуса соответствует единственный путь мартенситной реакции“.

При перечислении кинетических признаков следует разделять микрокинику, характеризующую рост отдельной пластины, и макрокинику, описывающую прирост общего количества мартенсита.

Микрокинетически мартенситное превращение можно определить как атермическое, поскольку, во-первых, скорость превращения (роста) отдельной пластины велика (порядка скорости звука) и не зависит от температуры, хотя МП протекает в широкой обла-

сти температур $T \approx (0 \div 10^3)$ К и, во-вторых, превращенный объем возрастает за счет образования новых кристаллов, а не в результате подрастания имеющихся. Следовательно, рост протекает как бы в отсутствии термической активации, что и раскрывает смысл термина „атермический“.

Макрокинетически различают изотермическое и атермическое МП. Изотермическое превращение может протекать при фиксированной температуре внешнего (по отношению к превращающемуся объему) теплового резервуара, причем существует зависящая от состава сплава оптимальная температура, при которой скорость увеличения макроскопического количества мартенсита максимальна. Существенным отклонением от оптимальной температуры (например, при быстром переохлаждении) можно подавить превращение. Такая макрокинетика типична для образования пакетного мартенсита.

При атермической макрокинетике количество мартенсита определяется степенью переохлаждения ниже температуры M_S , а изотермическая выдержка не приводит к увеличению превращенного объема. Такая картина присуща росту кристаллов с габитусами $\{2\ 5\ 9\} \div \{3\ 10\ 15\}$. Наблюдается и предельный случай атермического роста - „взрывное“ МП, когда за время одного „взрыва“ образуется заметная доля (десятки процентов) от всего превратившегося объема.

Интересно, что обнаружены сплавы [25] с двойной кинетикой превращения. Хотя, как правило, атермическое превращение следует при охлаждении за изотермическим, в [26] наблюдалась обратная последовательность.

Несмотря на большое значение для установления механизма мартенситного превращения данных о скорости роста мартенситных кристаллов, имеется сравнительно немного экспериментальных работ, в которых приводятся количественные результаты, указанные в табл. 1.1

Прокомментируем данные табл. 1.1. Появление отдельного кристалла мартенсита, изменяющего электросопротивление образца и приводящего к формированию импульсного сигнала, в [27] ре-

Таблица 1.1. Экспериментальные данные о скорости роста мартенсита

Материал	Скорость роста 10^3 м/с	Источник
Fe - 29,5 % Ni	1	[27]
Fe - 30 % Ni	(1,8 ÷ 2)	[28]
Fe - 32 % Ni	0,1	[23]
	1,1	[29]
	0,2	[29]
Fe - 0,35 % C - 8 % Mn	6,6	[30, 31]
Сталь типа 18-8	(0,1 ÷ 0,2)	[32]

гистрировалось осциллографически. По известным длительности импульса τ и размеру зерна l находили скорость $v = l \cdot \tau^{-1}$. По существу, аналогично оценивалась v и в [28]. Отличие данных [23] по порядку величины обусловлено попыткой оценить временной интервал по изменению отражательной способности поверхности образца за счет появления на поверхности рельефа в процессе МП. В результате, вместо характерного для [27, 28] масштаба $\tau \approx 10^{-7}$ с в [23] использовалось $\tau \approx 5 \cdot 10^{-6}$ с, относящееся не к росту отдельного кристалла, а к „взрывному“ автокаталитическому росту совокупности кристаллов. В [29] было внесено уточнение, в результате которого скорость $2 \cdot 10^2$ м/с связывается со скоростью поперечного (в толщину) роста кристалла, тогда как для радиальной (торцевой) скорости роста восстановлен порядок величины 10^3 м/с. В [27] на основе анализа формы сигнала впервые сделан вывод о возможном существовании двух налагающихся стадий роста мартенситного кристалла. Арский [33], анализируя работу [27], предположил, что начальный восходящий участок сигнала обусловлен быстрым образованием за счет радиального роста двухмерного зародыша кристалла, поверхность которого является неоднородностью, вызывающей повышение удельного сопротивления. Тогда ниспадающий участок сигнала, имеющий в $5 \div 6$ раз большую длительность, можно трактовать как рост образовавшегося зародыша в толщину, поскольку удельное электросопротивление мартенсита меньше, чем у аустенита. На основе такого разделения стадии роста из дан-

ных [27] Локшиным [30,31] для радиальной скорости роста получено значение $7 \cdot 10^3$ м/с, превышающее скорость продольных звуковых волн в аустените. Эта оценка подтверждена в [30,31] измерениями скорости распространения волны детонации через сталь. В случае, когда детонация инициировала мартенситное превращение, скорость распространения составляла $(6,5 \div 6,6) \cdot 10^3$ м/с, если же в стали мартенситное превращение вызывалось предварительным охлаждением, то скорость волны детонации в стали была заметно ниже $(4,8 \div 4,9) \cdot 10^3$ м/с. При погрешности измерений в [31] равной 4% такое различие можно рассматривать как указание на существование большой собственной скорости превращения. Хотя в [28] не найдено оснований для разделения стадии роста на две, в пользу реальности этого разделения убедительно свидетельствуют эксперименты [34–36], в которых при инициировании мартенситного превращения сильным магнитным полем наблюдалось быстрое появление тонких пластин мартенсита с последующим значительно более медленным обрастанием. Несомненно, подобные объекты в методическом отношении наиболее перспективны для последующих экспериментов по измерению радиальной (торцевой) скорости роста при регистрации импульсных сигналов. Наконец, данные [32], полученные при анализе сигнала акустической эмиссии, относятся к средней скорости роста группы кристаллов пакетного мартенсита, а не отдельной пластины. Таким образом, на основе опытных данных можно считать твердо установленным порядок величины 10^3 м/с радиальной (торцевой) скорости роста мартенситного кристалла при $\gamma - \alpha$ превращении. Данные же прямых экспериментов [30,31] дают основания считать скорость торцевого роста, превышающей скорость продольных упругих волн.

1.3 Устойчивость решетки вблизи температуры M_S . Проблема зародышеобразования при $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении

Выраженные признаки перехода I рода для $\gamma - \alpha$ МП позволяют предположить существование стадий зарождения и роста новой фазы. Важным является вопрос об устойчивости решетки аустенита при температуре M_S , тесно связанный с вопросом о существовании температуры T_C абсолютной потери устойчивости исходной решетки. Действительно, существование абсолютной температуры $T_C > 0$, при которой решетка, не содержащая дефектов, становится неустойчивой по отношению к бесконечно малым флуктуациям, означало бы неизбежность протекания МП в процессе охлаждения. В силу очевидного неравенства $M_S > T_C$, для сплавов с изотермической кинетикой превращения, подавляемого быстрым охлаждением ниже M_S , сразу следует отсутствие температуры T_C , что означает метастабильность (относительную устойчивость) исходной решетки аустенита при температурах не только из интервала $T_0 > T \geq M_S$, но и $T < M_S$. Один из признаков сплавов с атермической кинетикой, отмечаемый в большинстве монографий, состоит в независимости M_S от скорости охлаждения и, стало быть, в невозможности переохлаждения ниже M_S . Однако в экспериментах [37] удалось переохладить систему Fe -33,7% Ni вплоть до 4,2 К и вызвать затем „взрывное“ МП после отогрева в процессе изотермической выдержки. На отсутствие T_C для атермически превращающихся сплавов указывает также типичная для них неполнота превращения: превращение оканчивается при температуре M_f , $0 < M_f < M_S$, и дальнейшее охлаждение, несмотря на значительный непревратившийся объем (до десятков процентов), к приращению количества мартенсита не ведет.

Исследования температурной зависимости упругих модулей [38, 39], как и дисперсионных кривых фононного спектра [38–41], показывают в большинстве случаев отсутствие даже тенденции к потере устойчивости. Наблюдающийся [38] аномальный ход темпера-

турной зависимости упругих модулей в системах Fe-Ni ($> 30\%$ Ni), испытывающих при $T > M_S$ ферромагнитное упорядочение, скорее следует связывать с влиянием этого упорядочения [42, 43], чем с проявлением тенденции решеточной нестабильности, то есть речь идет о „нормальных“ упругих модулях, но ферромагнитной системы. Иными словами, по отношению к отдельным фононным модам малых амплитуд решетка аустенита сохраняет устойчивость.

Эксперименты [44] с малыми частицами (диаметром $> 10^{-6}$ м) убедительно продемонстрировали, что при одинаковых размерах частиц МП в процессе охлаждения развивается далеко не во всех из них, что свидетельствует в пользу гетерогенной природы зарождения мартенсита в определенных благоприятных центрах. К тому же выводу приводят наблюдения при термоциклировании, в которых первоначальный и повторный рост кристаллов мартенсита, как правило, происходит в одних и тех же местах. Ряд результатов электронномикроскопических наблюдений, указывающих на причастность дислокаций к процессам зарождения мартенсита, приведен в [45].

Хотя в целом гетерогенный характер зарождения не вызывает сомнений, имеется ряд экспериментов по ЯГР [46], диффузному рассеянию электронов и рентгеновских лучей [47] (см. также обзоры [45, 48]), по измерению сопротивления микропластической деформации вблизи M_S [49], свидетельствующих об особом предпереходном состоянии решетки аустенита, выражающемся [46, 47] в анизотропном возрастании среднеквадратичных амплитуд колебаний решеточных мод с волновыми векторами выделенных направлений (и выделенными поляризациями) и в уменьшении сопротивления малой деформации [49]. В случае бездефектной решетки в отсутствие смягчения фононных мод подобную особенность можно трактовать как результат нелинейного (ангармонического) взаимодействия мод, сопровождающегося образованием уединенных областей ближнего порядка смещений (ОБПС), предложенного в [50].

Заметим, что проведенное в [50] рассмотрение носило термодинамический характер (исследование устойчивости кристалла относительно появления квазистатических искажений решетки, мо-

делируемых пакетом „замороженных“ волн). Более общей ситуации, по-видимому, соответствует перестройка спектра элементарных возбуждений решетки, в результате которой возникают подвижные ОБПС солитонного типа [51], стабилизация которых обеспечивается локализацией в окрестности ОБПС электронов, подобно тому, как это имеет место в флуктуонной модели [52]. Разумной качественной трактовкой, объединяющей концепции гетеро- и гомогенного зарождения мартенсита, является, на наш взгляд, картина зародышеобразования, включающая как необходимый элемент процесс локализации ОБПС в окрестности неоднородности, задаваемой отдельной дислокацией или их скоплением. Очевидно, подобная точка зрения согласуется как с чисто термодинамическими представлениями [10, 53], поскольку ослабление энергии связей в окрестности дефекта в значительной мере компенсирует рост энергии за счет образования границы раздела, так и с известным в нелинейной динамике явлением пиннинга [54]. Такая модель естественно смыкается с „моделью пути реакции“, предложенной Коэном, Мэчлином и Параньяном [7], в которой:

1. координированное перемещение атомов происходит путем „быстрой последовательной смены промежуточных структур в определенной области . . .“, увеличивающейся „подобно распространению упругой волны“;
2. „активация происходит путем флуктуационного изменения конфигурации атомного расположения внутри зародыша, а не его размера“;
3. зарождение идет на центрах искажений, содержащих ряды дислокаций.

Важным обстоятельством [50] является возможность потери устойчивости ОБПС относительно увеличения своих размеров при наличии частичного смягчения решетки. Но в окрестности дислокаций локальное смягчение имеет место всегда, поэтому поперечный размер $2 \cdot r_0$ локализуемой ОБПС должен превышать размер подвижной ОБПС при отсутствии дефекта.

В чисто дислокационных моделях зарождения (см., например, [55]) температура M_S ассоциируется с образованием первой дислокационной петли, причем генерация последующих петель происходит спонтанно. Тогда расширение петель с околосвуковой скоростью может привести к быстрому образованию зародыша макроскопической толщины. Полагая, что зародыш имеет два характерных размера - длину, определяемую прямолинейным отрезком дислокационной линии, и поперечный диаметр $2 \cdot r$, для $r \approx (10^{-6} \div 10^{-7})$ м, порядка толщины пластины, оценим время образования макрозародыша t_N как $t_N \approx r \cdot c^{-1} \approx (10^{-9} \div 10^{-10})$ с, где c - скорость порядка звуковой.

В модели с локализующейся ОБПС такая оценка предполагает, что начальный размер ОБПС r_0 существенно меньше r (в [50] $r_0 \approx 10^{-9}$ м), и акт локализации стимулирует рождение первой дислокационной петли. Тогда последующее расширение петель приводит к синхронному росту r_0 до макроразмера r . Следует, однако, иметь в виду, что модель ОБПС в [50] с самого начала ограничивалась лишь коротковолновыми смещениями, поэтому в общем случае не исключено существование солитонных решений с размерами r_0 порядка r . Трансформация ОБПС с размером $r_0 \approx 10^{-7}$ м в макрозародыш будет протекать за время $t_N \approx 10^{-11}$ с, так как теперь атомам в течение t_N нужно преодолеть расстояние не более $\varepsilon \cdot r$, где $\varepsilon \approx 0, 1$ - величина относительной деформации при $\gamma - \alpha$ превращении [56].

Заметим, что обычно принимаемая форма зародыша в виде тонкого сплюснутого сфероида, с одной стороны, диктуется равновесными термодинамическими оценками, а с другой стороны, соображениями подобия исходной формы зародыша с конечным линзовидным кристаллом. Последнее обстоятельство приводит к моделированию роста зародыша в схеме расширяющихся дислокационных петель, причем в радиальном направлении кромка растущего кристалла имеет моноатомную толщину. Картина постепенного утолщения сфероида для линзовидных кристаллов требует объяснения центральной пластинчатой зоны - мидриба, постоянную толщину которого разумно рассматривать как один из характерных

масштабов структуры. В термодинамике это масштаб [57] критической толщины кристалла, отвечающий смене механизмов дополнительной деформации (двойникование при меньшей толщине, скольжение - при большей), так что формирование мидриба в процессе расширения от моноатомных до конечных размеров $r \approx 10^{-6} \div 10^{-7}$ м в принципе возможно.

Другая возможность состоит в быстром возникновении макрозародыша, обсуждавшемся выше, размер r которого определит длины волн смещений решетки, возбуждающихся в неравновесных условиях. Тогда, если имеется механизм, эффективно поддерживающий существование волн, и уровень деформации ε , вызываемый волнами, превышает пороговое значение, необходимое для инициирования мартенситного превращения, рост макрозародыша будет происходить в волновом режиме, а характерным масштабам структуры будут отвечать определенные длины волн. Очевидно, что в этой картине акцентируется внимание на неравновесности состояния, присущей процессу зародышеобразования. В частности, ясно, что высокий уровень неравновесности вблизи границы растущей фазы может поддерживаться в условиях быстрого роста, когда процесс выделения тепла является адиабатическим [58, 59]. Тогда перепад температур между γ -и α - фазами $\Delta T \approx Q \cdot C_{sp}^{-1}$ (Q - удельный тепловой эффект, C_{sp} - удельная теплоемкость) окажется сравнимым с величиной переохлаждения $T_0 - M_S$, что обеспечит высокий уровень градиента температуры в приграничной области. Это обуславливает постановку задачи об исследовании неравновесной электрон-фононной системы с целью выявления условий генерации волн смещений решетки.

В изложенной качественной схеме переход от стадии зарождения к стадии роста носит непрерывный характер, указывающий на неустойчивость возникающих в неравновесных условиях зародышей к быстрому росту, что предполагает существование эффективных механизмов (путей) быстрого роста. Последнее обстоятельство может играть решающую роль для перехода системы в новое состояние. Действительно, при наличии нескольких состояний с минимумами свободной энергии в первую очередь „...“ реализуются те

состояния, которые возникают с большей скоростью ...“ [13]. Таким образом, именно кинетический фактор выступает на первый план, что вполне естественно для стадии роста. Хотя кинетическая картина превращения не входит в сферу действия термодинамического описания, связь термодинамических и кинетических условий возникновения фаз существует. При этом роль термодинамики сводится, главным образом, к определению термодинамического стимула превращения, энергий активации зарождения и роста.

Отсутствие T_C и, стало быть, относительная устойчивость ГЦК решетки при температуре M_S ставят вопрос о величине энергетического барьера, преодолеваемого системой в процессе зарождения и роста. Этот вопрос тесно связан с проблемой большой величины переохлаждения $T_0 - M_S \approx 200$ К, отчетливо сформулированной в [58, 59]. Суть проблемы в значительном различии переохлаждения $\Delta T = T_0 - M_S \approx 45$ К, необходимого для компенсации энергетических затрат $E_e \approx 50$ кал/моль на выполнение внешней работы в процессе мартенситного превращения, с величиной $T_0 - M_S$. Одно из приемлемых объяснений [7] сводится к тому, что „кинетику процесса контролирует скорость перехода системы через энергетический барьер, связанный с образованием центров новой фазы, поскольку рост кристаллов мартенсита происходит почти мгновенно и, следовательно, степень переохлаждения $T_0 - M_S$ может определяться не только термодинамическими, но и кинетическими характеристиками процесса“.

В обсуждавшейся выше модели адиабатического возникновения макрозародыша тепловой эффект превращения Q можно интерпретировать [56] как результат распределения энергии E колебаний атомов вблизи новых положений равновесия с небольшим числом выделенных направлений поляризации (так как деформация анизотропна) по всем $3 \cdot N_N$ колебательным модам зародыша (N_N - число атомов в объеме зародыша). Оценим E , полагая, что при образовании зародыша возбуждаются в основном продольные колебания, поляризованные в двух направлениях (обозначим их x и y). Вклад от одной моды, нумерованной волновым вектором \mathbf{q}_i ($i = x, y$), в энергию E запишем в виде

$$E_{\mathbf{q}_i} = \frac{1}{2} M \omega_{\mathbf{q}_i}^2 |\mathbf{u}_{\mathbf{q}_i}|^2 N_N, \quad (1.1)$$

где M - масса атома, $\omega_{\mathbf{q}_i}$ - циклическая частота, $\mathbf{u}_{\mathbf{q}_i}$ - амплитуда колебаний. Заметим далее, что связанную с колебаниями относительную деформацию ε характеризует максимальное значение

$$\varepsilon_m \approx \frac{2u}{\lambda/2} = \frac{2uq}{\pi}, \quad (1.2)$$

в котором $\lambda/2$ - расстояние между двумя плоскостями, колеблющимися в противофазе (λ - длина волны). Считая ε одинаковой для всех q_i , заменяя $\omega_{\mathbf{q}_i}$ на $\omega_{\mathbf{q}_i} = cq_i$, где c - скорость звука, и учитывая, что q_x, q_y , принимают $N_{N_x} \approx N_{N_y} \approx 2r_N/a$ значений (r_N - радиус макрозародыша, a - параметр решетки), из (1.1), (1.2) имеем:

$$E = \sum_{i, \mathbf{q}_i} E_{\mathbf{q}_i} \approx \frac{\pi^2}{2a} r_N N_N M c^2 \varepsilon_m^2. \quad (1.3)$$

Оценку ε к моменту времени образования зародыша $t = t_N$ получим, считая

$$\frac{E}{N_N M} \approx \frac{\pi^2}{2} r_N c^2 \varepsilon_m^2 \approx Q, \quad (1.4)$$

где Q - удельный (на единицу массы) тепловой эффект. Тогда при $Q \approx 4 \cdot 10^4$ Дж/кг (сплав Н30 по данным [22]), $r_N \approx 10^{-7}$ м, $a \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, $c = 5 \cdot 10^3$ м/с находим из (1.4) $\varepsilon_m \approx 10^{-3}$. Таким образом, по крайней мере, для наиболее долгоживущих мод с квазиимпульсом $q \approx q_{\min} \approx \pi \cdot r_N^{-1}$ к моменту $t = t_N$, являющемуся конечным для стадии зародышеобразования и одновременно начальным для стадии роста, можно ожидать, что пороговое значение деформации ε_{th} имеет порядок $\varepsilon_m \approx 10^{-3}$. Полезно сопоставить этот результат с известными данными [13, 49] по влиянию внешних напряжений на МП. Основания для сопоставления, например, с данными по влиянию растяжения, очевидны, если заметить, что $\lambda/2$ в (1.2) играет роль начальной длины l образца, а амплитуда u - роль абсолютного удлинения Δl , и учесть, что

$\lambda_{\max} = 2 \cdot \pi / q_{\min} \approx (10^{-7} \div 10^{-6})$ м во много больше параметра решетки a , то есть лежат в области масштабов, описываемых в механике сплошных сред. Интересная информация заключается в существовании температуры M_{elast} [49] вблизи M_S ($M_{elast} - M_S \approx 35 \div 40$ К) такой, что при температурах T из интервала $M_S < T < M_{elast}$ мартенситное превращение вызывается внешними упругими напряжениями σ_m , то есть выполняется неравенство $\sigma_m < \sigma_y$ (σ_y - предел текучести (yield stress)). Поскольку на диаграмме напряжение - деформация значениям $\sigma \leq \sigma_y$ отвечают $\varepsilon_{th} \leq 10^{-3}$, можно сделать вывод о приемлемости оценки $\varepsilon_{th} \leq 10^{-3}$ для пороговой деформации.

Значит, в модели образования макрозародыша, неустойчивого к процессу роста, большое переохлаждение $T_0 - M_S$ интерпретируется как необходимое условие для возбуждения колебаний с конечными амплитудами (и частотами), обеспечивающими выполнение условия $\varepsilon_{th} \approx 10^{-3}$, которое одновременно дает количественный критерий устойчивости решетки γ - фазы в точке M_S .

1.4 Успехи и трудности теоретического описания $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения

Всестороннее обсуждение теории фазовых изменений, как отмечается в [10], сводится в основном к обсуждению двух вопросов:

1. Почему происходит данное изменение фазы?
2. Каков механизм превращения?

Чтобы ответить на первый вопрос обычно исследуют стабильность различных фаз, отдавая предпочтение фазе с наименьшим значением свободной энергии Гиббса $G(P, T)$, задаваемой соотношением [60]:

$$G(P, T) = H - TS = U + PV - TS, \quad (1.5)$$

где H , U , S , V - удельные (на один моль вещества) значения энтальпии, внутренней энергии, энтропии и объема, P - давление.

Вычисление термодинамических (макроскопических) величин в (1.5) в рамках строгого микроскопического (квантостатистического) подхода представляет сложную задачу, поскольку значения G для разных фаз отличаются незначительно и при расчете нельзя использовать радикальных упрощений. Тем не менее, причины полиморфных превращений в чистом железе в настоящее время представляются достаточно ясными.

Высокотемпературный ГЦК-ОЦК ($\gamma - \delta$) переход при $T_{\gamma-\delta} = 1665$ К обусловлен, по-видимому, энтропийным членом в (1.5), поскольку как вклад колебаний атомов в более рыхлой ОЦК-решетке, так и разупорядоченных (больших по величине) магнитных моментов в S для δ -фазы больше, чем для γ -фазы [61]. Низкотемпературный же ГЦК-ОЦК ($\gamma - \alpha$) переход при $T_{\gamma-\alpha} = 1183$ К, представляющийся с точки зрения колебательного вклада атомов в S парадоксальным, объясняется уменьшением внутренней энергии α -фазы при ферромагнитном упорядочении [62–64]. Не останавливаясь на вопросе о стабильности фаз более подробно, далее будем считать, что ответ на него известен.

Разумеется, ответ на первый вопрос „почему“ применительно к $\gamma - \alpha$ мартенситному превращению еще не получен, так как вторая часть вопроса о „данном изменении фазы“ относится к особенностям превращения и тесно смыкается с вопросом о механизме превращения.

При трактовке морфологических признаков (см. п. 1.2) низкотемпературного (габитусы $\{259\} \div \{31015\}$) мартенсита значительного успеха добилась кристаллогеометрическая теория, основные положения которой достаточно полно отражены в [13, 18]. Эта теория рассматривает мартенситное превращение как деформационный процесс с макроскопически инвариантной плоскостью - плоскостью габитуса. Деформация включает чистую деформацию решетки и деформацию при инвариантной решетке (ДИР). Деформацию решетки описывают либо в двух- (или более) сдвиговой схеме, дополненной дилатациями, либо в схеме деформации Бейна с последующими поворотами, обеспечивающими выполнение ориентационных соотношений. Схему деформации Бейна иллюстрирует

рис. 1.1, взятый из [13]. Выделенная в двух смежных ячейках ГЦК решетки объемноцентрированная (с тетрагональностью $\sqrt{2}$) ячейка для превращения в кубическую должна испытать сжатие вдоль оси $[001]$ на 20% и расширение приблизительно на 13% вдоль осей $[100]$ и $[010]$ (либо вдоль осей $[110]$ и $[1\bar{1}0]$). Направления сжатия и растяжения указаны на рис. 1.1 жирными стрелками, заштрихована плотноупакованная плоскость $(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$. Рис. 1.2 иллюстрирует неоднородную ДИР в случае скольжения (рис. 1.2а) и двойникования (рис. 1.2б). Необходимость привлечения ДИР обусловлена тем, что чистая деформация Бейна не является деформацией с инвариантной плоскостью (у такой деформации одна из главных компонент обращается в нуль, а две другие имеют разные знаки). Используя же ДИР в качестве дополнительной деформации, суммарную макродеформацию превратившейся области в некоторых случаях удастся свести к такому виду. В частности, для низкотемпературного мартенсита в качестве ДИР было выбрано двойникование и предсказано различие объемных долей двойников, подтвержденное в дальнейшем экспериментально. К недостаткам подобного подхода, согласно [65], следует отнести: отсутствие физического обоснования выбора конкретных механизмов деформации и какого-либо „... из, по-видимому, значимых принципов: минимума поверхностной энергии, минимума величины действующего сдвига или минимума перемещения атомов“. Кроме того, эти феноменологические теории не объясняют „изменения каких-либо кристаллографических особенностей превращения в зависимости от изменения состава или температуры“.

Термодинамический подход [17, 19, 66], последовательно учитывающий энергию внутренних напряжений в системе сосуществующих γ - и α -фаз и предполагающий, что образование конечной структуры отражает стремление системы к минимуму свободной энергии (минимуму упругой энергии внутренних напряжений), позволяет рассматривать кристаллогеометрическую схему как частный случай контакта фаз по инвариантной плоскости без возникновения напряжений. Кроме того, обосновываются равновесная пластинчатая форма кристаллов, особенность их внутрен-

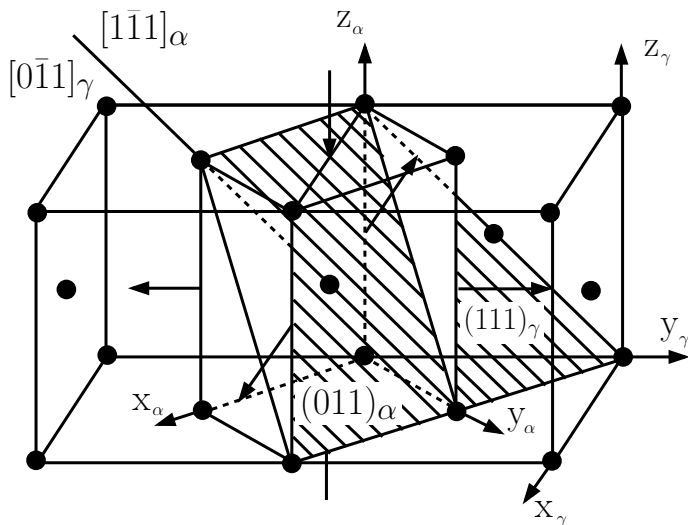


Рис. 1.1. Соответствие плоскостей мартенсита и аустенита при перестройке решетки ГЦК \rightarrow ОЦК по Бейну [13]. Заштрихована плоскость $(111)_\gamma \parallel (011)_\alpha$. Жирные стрелки указывают направления сжатия $[001]_\gamma$ и растяжения - $[100]_\gamma$, $[010]_\gamma$, соответственно

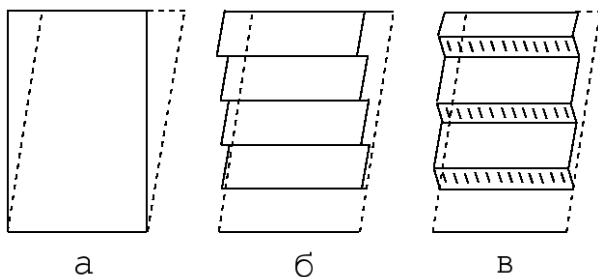


Рис. 1.2. Восстановление формы превращенной области дополнительной деформацией [13]: (а) - собственная деформация превращения; (б) - восстановление формы скольжением; (в) - восстановление формы двойникованием

него строения (полисинтетическое двойникование) и общие закономерности образования групп кристаллов как в условиях образца со свободными границами, так и в поле внешних напряжений [67–69]. Трактовка кинетических особенностей опирается на анализ вели-

чин энергетических барьеров, преодолеваемых при данном типе роста, термодинамической движущей силы превращения и оценке на этой основе роли релаксационных процессов. В частности, смелой основных механизмов релаксации (скольжения в аустените на двойникование в мартенсите) объясняется наблюдаемое различие между реечным и пластинчатым мартенситом.

Вопрос о механизме роста сводится к рассмотрению модели границы фаз и исследованию ее подвижности. Так, например, в [17, 19, 70] анализировалась модель границы, возникающей в случае, когда мартенситное превращение описывают в схеме деформации с инвариантной плоскостью. На рис. 1.3, взятом из [19], граница представлена переходным слоем с изменяющимся по величине и направлению вектором деформации \mathbf{S} , характеризующим положения атомов (l_0 - ширина границы, равная нескольким параметрам решетки). Обозначение f_n относится к плотности свободной энергии, x - ось координат, параллельная нормали \mathbf{n} к инвариантной плоскости (к границе фаз), f_n^a и Δf - величины активационного барьера и термодинамической движущей силы соответственно. Данная модель подобна модели доменной стенки в ферромагнетиках [71] и реализуется при включении в плотность свободной энергии градиентного члена.

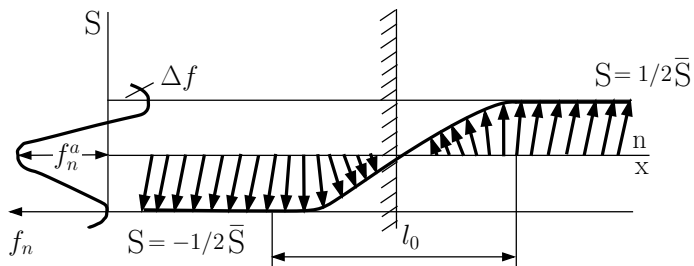


Рис. 1.3. Структура межфазной границы [19]

Применительно к МП в системах Fe - Ni, Fe- C модель границы должна удовлетворять двум, на первый взгляд, противоречивым требованиям, а именно: метастабильная устойчивость аустенита в точке M_S (см. обсуждение в п. 1.3) предполагает конечное значение

величины барьера f_n^a , тогда как практически не зависящая от температуры скорость роста мартенсита (в широком температурном интервале) свидетельствует о безбарьерном характере движения. В [17, 19, 70] подвижность границы фаз предлагается рассматривать по аналогии с подвижностью дислокаций в периодическом потенциале, обусловленном периодичностью структуры в направлении \mathbf{n} , подобно тому, как это делается в модели Френкеля-Конторовой. В результате, вместо барьера f_n^a рассматривается барьер f_1^a (см. рис. 1.4, взятый из [19]), разделяющий состояния нестабильной (атомы существенно отклоняются от минимумов к вершинам потенциальной „гребенки“) и стабильной (атомы в ямах потенциальной „гребенки“) конфигураций границы, который сравнивается с величиной Δf движущей силы. Считается, что при $\Delta f > f_1^a < f_n^a$ граница будет двигаться безбарьерно (надбарьерно) со скоростью, сравнимой со скоростью звука c_t (имеются в виду поперечные звуковые волны) и не зависящей от температуры. Следует, однако, иметь в виду, что расчет скорости движения границы не проводился (это и не входит в задачи термодинамического анализа) и утверждение о большой скорости движения границы нуждается в обосновании. Кроме того, согласно данным [30, 31], скорость роста кристаллов мартенсита превышает не только скорость поперечных, но и продольных упругих волн c_l , и модель, для которой роль предельной играет скорость $c_t < c_l$, заведомо не применима для описания торцевого (радиального) роста пластинчатого кристалла, хотя трактовка поперечного (в толщину) роста в рамках такой модели представляется возможной.

Сверхзвуковая скорость роста приводит к еще одной трудности. Обычно наблюдаемые границы γ - и α -фаз относятся к полукогерентным [13]. Высокая подвижность частично когерентной границы связывается с наличием параллельных рядов скользящих дислокаций, образующих границу [72]. Тогда, если считать, что перемещение границы, а значит и МП, обусловлены скольжением дислокаций, придется считать скорость движения дислокаций v сверхзвуковой. Напомним, что в континуальной модели движение дислокаций со скоростью, превышающей c_t запрещено [73], но в

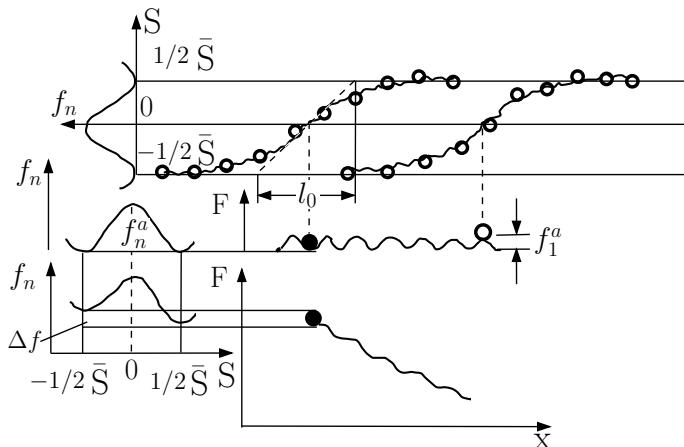


Рис. 1.4. Определение барьера f_1^a для межфазной границы, аналогичного барьеру Пайерлса для дислокации [19]

реальных кристаллах с дискретной атомной структурой в принципе возможно [74]. Однако дислокация в области скоростей $v > c_t$ должна излучать энергию (эффект, аналогичный излучению Черенкова). Согласно [74], напряжение σ , необходимое для поддержания скорости $v > c_t$, можно оценить по формуле

$$\sigma \approx \left[\frac{v^2}{c_t^2} - 1 \right] \cdot \frac{\mu b}{2\pi a},$$

где μ - сдвиговой модуль; b - вектор Бюргерса; a - расстояние между плоскостями скольжения.

Например, при $v \approx 2c_t$ и $b \approx a$ значение σ превышает теоретический предел прочности $\approx 0,1 \cdot \mu$, то есть уже не имеет физического смысла. По существу та же трудность возникает и при анализе распространения ударных волн в твердых телах. Альтернативные точки зрения на роль дислокаций при распространении ударных волн представлены в статьях Виртмана и Мейерса, Мура в [75]. Согласно Виртману, сверхзвуковое движение дислокаций (дислокаций Смита) вместе с фронтом ударной волны возможно при напряжениях равных теоретическому пределу прочности. Однако Мейерс и Мур, опираясь на опытные факты, считают эту

точку зрения ошибочной и полагают, что дислокации рождаются в процессе распространения ударной волны, отстают от ее фронта и останавливаются. Таким образом, не принимая предположения о реализации в ходе $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения уровня напряжений, равного теоретическому пределу прочности, движение границы раздела фаз следует рассматривать как некоторый нелинейный волновой процесс, в ходе которого дислокации рождаются, формируя межфазную границу позади распространяющегося волнового фронта.

Работа Мэчлина и Коэна [76] была первой, где в отчетливой форме сформулирован волновой подход для решения задачи роста мартенсита. Не конкретизируя значений скоростей, авторы [76] предлагают схему двух последовательных волн деформации. Первая из волн распространяется от малого дискообразного зародыша в радиальных направлениях, вызывая однородную деформацию пластинообразной области, поверхность которой (габитусная плоскость) совпадает с инвариантной плоскостью. Когда напряжения, вызванные деформацией от первой волны, достигают некоторого критического значения (предположительно предела текучести) в перпендикулярном для габитусной плоскости направлении начинается распространение второй волны, приводящей к сдвиговой неоднородной деформации (однородной лишь макроскопически), завершающей процесс формирования мартенситной пластины. Данная схема была нацелена на прямую интерпретацию кристаллогеометрической теории: первая волна описывает чистую деформацию решетки, а вторая - деформацию при инвариантной решетке. Однако, в отличие от геометрической схемы, где инвариантная плоскость возникает лишь при совместной деформации (чистой и ДИР), в [76] предполагается формирование габитусной плоскости уже на первом этапе чистой деформации. Разумеется, оснований для предположения о том, что неоднородная деформация (например, двойникование) наступает после образования пластинчатой области, не имеется. Более того, в настоящее время нет сомнений в том, что неоднородная деформация реализуется в ходе превращения (двойники превращения [13]). Тем не менее, идея

разбиения роста кристалла на две стадии выглядит вполне современной (см. обсуждение в п. 1.2).

В [77] в основном сохраняется идеология, предложенная в [76]. Дополнительно постулируется, что распространяющаяся в радиальном направлении волна является продольной, вызывающей МП в центральной зоне (мидрибе). Превратившиеся участки мидриба играют роль зародышей второго порядка для возбуждения поперечной, распространяющейся в перпендикулярном к плоскости габитуса направлении, волны превращения. Таким образом, именно продольная волна превращения инициирует процесс роста прилегающей к мидрибу области. Основным фактором, обеспечивающим инициирование, считается высокое давление ($7,4 \cdot 10^9$ Па) со стороны расширившегося (приблизительно на 5%) мидриба. В результате непосредственно перед фронтом поперечной волны превращения движутся короткие импульсы волн ударного сжатия и пластического сдвига, постепенно уширяющиеся, а после прекращения роста затухающие до уровня упругих волн. Сказанное иллюстрирует рис. 1.5, взятый из [77], на котором в последовательные моменты времени изображено сечение растущего линзовидного кристалла (плоскость чертежа перпендикулярна плоскости габитуса).

Мидриб представлен отрезком прямой линии, делящей линзовидную область на две равные части, стрелки указывают направления распространения волн, заштрихованная область соответствует области импульсов волн сжатия и сдвига и, наконец, ломаная линия, пересекающая кристалл, демонстрирует, как искажается первоначально прямая риска (пунктир на рис. 1.5г) в процессе МП. Используя данную картину превращения в предположении, что продольная и поперечная волны превращения распространяются со скоростями $v_l = c_l$ и $v_t = c_t$ соответственно, в [77] найдено уравнение поверхности линзовидного кристалла, что и было основной целью работы. Отметим также, что в [77] предполагается генерация дислокаций, оправданная при значительных напряжениях, развиваемых в волнах, и движение границы не связывается с движением дислокаций. Хотя значения v_l в [77] несколько занижены, а v_t - завышены (см. обсуждение данных по скорости роста

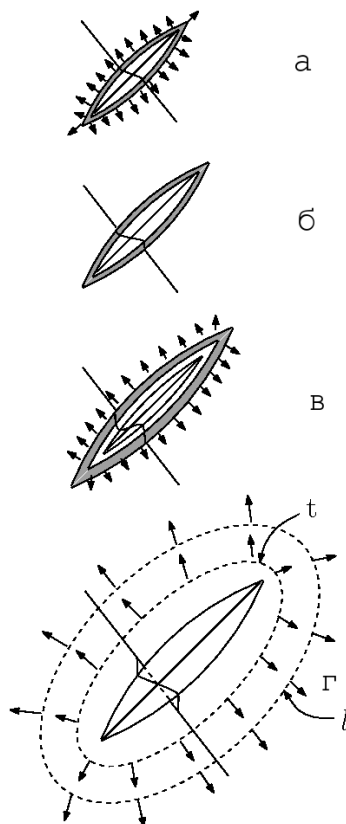


Рис. 1.5. Схема роста линзовидного кристалла мартенсита [77]: (а): волны пластического сдвига и сжатия, предшествующие фронту превращения; (б) и (в): рост кристалла прекратился, затухающие волны пластической деформации продолжают распространяться; (г): пластические волны затухли, возбудив поперечные (t) и продольные (l) упругие волны

в п.1.2) качественная картина выглядит достаточно привлекательно. Однако описание механизма образования мидриба, имеющего внутреннюю двойниковую структуру и играющего ведущую роль в формировании линзовидного кристалла, в [76, 77] отсутствует.

Рост мартенсита с позиций теории ударных волн обсуждался также в [31, 78, 79]. Локшин рассматривал случай сильных ударных волн, позволяющий объяснить сверхзвуковые значения скоро-

сти роста. По оценкам [31, 78] развиваемое в ударной волне напряжение (давление) составляет $(1,4 \div 1,6) \cdot 10^{10}$ Па, что в два раза превышает значение, использованное в [77], и примерно соответствует теоретическому пределу прочности. Крюссар, основываясь на данных [27], рассмотрел случай слабых ударных волн, бегущих с дозвуковыми скоростями. Общей слабостью этих работ является отсутствие каких-либо трактовок богатых морфологических признаков превращения.

Если не акцентировать внимание на вопросе о роли дислокаций в процессе формирования и перемещения границы фаз, то движение границы в рассмотренных выше моделях можно интерпретировать единым образом как распространение уединенного фронта (называемого также волной переключения [80]) - возмущения ступенчатого типа (как на рис. 1.3), слева и справа от которого реализуются разные значения деформации $\varepsilon_{\alpha,\gamma}$, характерные для γ - и α -фаз. Основой для описания такого процесса может служить квазилинейное параболическое уравнение (нелинейное уравнение диффузного типа), обсуждаемое в главе 6 монографии.

Остановимся теперь на работах, в которых главное внимание уделяется роли гиперболических волн в МП. Эти волны удовлетворяют в общем случае нелинейным уравнениям, возникающим из линейного гиперболического (классического волнового уравнения со вторыми производными по координатам и времени), для которого синусоидальные волны являются фундаментальным решением. Интерес к волнам данного типа обусловлен, с нашей точки зрения, тем, что они могут легко представляться совокупностями фононов (квантоваться), а переход на фононный „язык“ позволяет, в свою очередь, использовать хорошо разработанные в физике твердого тела микроскопические модели, то есть установить связь между микро- и макроописаниями.

В [81] отстаивается, преимущественно в декларативной форме, описание МП с волновых позиций. Дислокациям отводится сугубо пассивная роль; в связи с ненаблюдаемостью статических зародышей мартенсита предлагается не различать стадии зарождения и роста, а кинетику любых МП рассматривать как „взрывную“

(медленный рост отдельного кристалла считается идущим через последовательность быстрых микровзрывов с продолжительными паузами между ними). Дополнительно к уже отмеченным ранее положениям укажем еще только на одно: особенности строения мартенсита в [81] предлагается трактовать как следствие действия комбинаций двух (и более) решеточных мод, распространяющихся со скоростями упругих волн.

Кайзер [82] был первым из исследователей, попытавшихся связать активацию атермического (взрывного) МП в сплавах железа со стимулированным излучением фононов (эффект фононного лазера), реализующимся при некоторой степени переохлаждения ниже точки T_0 равновесия фаз. Оптимальной в [82] считается частота дебаевских фононов $\nu_{AM} \approx 10^{13}$ Гц с энергией $h\nu_{AM}$, принимаемой равной разности удельных свободных энергий $G_A - G_M$ (в пересчете на один атом) метастабильного аустенита G_A и стабильного мартенсита G_M . Излучающей системой считаются атомы, совершающие согласованный (кооперативный) прыжок с энергетического уровня G_A на G_M . Поскольку начальная населенность уровня G_M равна нулю (атомы находятся в решетке аустенита) и $G_A > G_M$, указанной начальной картине отвечает максимальная инверсия населенностей уровней G_A и G_M . Распространение излученных фононов по превращающейся решетке сопровождается ростом их числа, то есть ростом амплитуды акустической волны до уровня, позволяющего реализовать рождение дефектов. Кайзер предложил также интерпретировать зигзагообразную структуру, представляющую собой группы относительно мелких кристаллов, образующихся между двумя крупными пластинами, как следствие многократного отражения от крупных пластин стимулированного фононного излучения. На рис. 1.6а схематически изображена наблюдаемая зигзагообразная структура (в металловедческих работах более распространенными названиями являются молние- и фермообразная структура), а на рис. 1.6 - схема Кайзера (сплошные линии). Характерной чертой этой структуры является присутствие двух наборов пластин: любые две пластины из одного и того же набора параллельны, а пары пластин из разных наборов

сопрягаются под острым углом. Заметим, однако, что при непараллельных крупных пластинах построить две такие совокупности пластин на основе закона отражения нельзя, то есть интерпретацию Кайзера нельзя признать последовательной (легко убедиться, что построение на рис. 1.6б просто воспроизводит наблюдаемую закономерность, но с законом отражения не согласуется). Уязвимой представляется как трактовка излучающей системы, так и выбор частоты излучения. Действительно, в случае хорошо разработанной модели двухуровневого лазера (см., например, [83]) речь идет о парах инверсно населенных уровней энергии, существующих одновременно в определенных точках пространства, а излучающая подсистема частиц, как правило, подчиняется статистике Ферми-Дирака. В схеме же Кайзера состояние с энергией G_M лишь потенциально возможно, атомы находятся в состоянии с энергией G_A . Кроме того, коротковолновые фононы являются сильнозатухающими, и обоснование возможности их генерации маловероятно. По-видимому, большие перспективы для описания излучения при атомных скачках открывает концепция атом-вакансионных состояний [84] в применении к состоянию резко переохлажденного аустенита. Не останавливаясь подробнее на перечислениях или расшифровках возможностей, констатируем, что в [82] обоснование механизма генерации фононов отсутствует.

Трудность с выявлением механизма генерации осталась непреодоленной и в работе [85], что видно из сравнения пунктов 2, 3 табл. 1.2, взятой из [85], в которой сделана попытка провести аналогию между лазером и мартенситным превращением. Дополнительно отметим, что требование критической скорости охлаждения вплоть до M_S (пункт 3 таблицы) не является необходимым для протекания МП, достаточно пройти область высоких температур, где существенна диффузия, чтобы подавить диффузионные процессы, а дальнейшее охлаждение может быть медленным. Для описания волны поперечных смещений в [85] используется волновое уравнение, заимствованное из теории лазеров

$$\nabla^2 \vec{\xi} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\xi}}{\partial t^2} = -\frac{\partial^2 \mathbf{p}}{\partial t^2}, \quad (1.6)$$

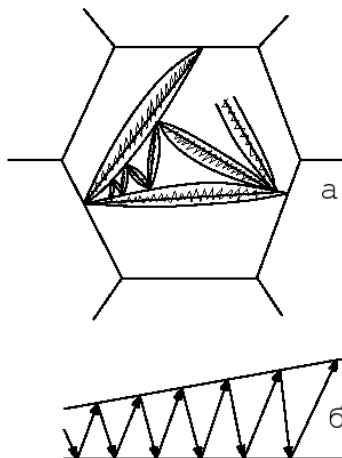


Рис. 1.6. Фермообразная структура кристаллов мартенсита: (а): совокупность линзовидных двойникованных кристаллов в реалистической схеме [24]; (б): идеализированная схема многократного отражения стимулированных фононов [82]

где c - скорость звука; $\vec{\xi} = [\nabla, \mathbf{u}]$ - аксиальный вектор вращения, сопоставляемый антисимметричному тензору вращений [86], \mathbf{u} - вектор смещений, ∇ - оператор градиента в координатном пространстве, \mathbf{p} - аналог вектора поляризации среды в теории лазеров, берется в виде $\mathbf{p} = c^{-2} \hat{\varepsilon} \vec{\xi}$, где $\hat{\varepsilon}$ - матрица, характеризующая деформацию решетки при превращении. Исследование поведения амплитуды на примере стоячих волн в [85] проводится феноменологически с помощью известных уравнений Ван-дер-Поля и Дуффинга в предположении, что квадрат частоты осциллиций в гармоническом приближении обладает критической температурной зависимостью, типичной для мягкой моды: $\omega_0^2 \sim (T - T_0)$.

Обсуждение работ, в которых исследуется влияние на протекание МП внешнего магнитного поля, а также магнитного упорядочения аустенита, будет проведено в гл. 5.

Таблица 1.2. Аналогия между лазером и мартенситным превращением

Лазер	Мартенситное превращение
1. Когерентные фотоны	1. Когерентные фононы
2. Инверсия населенностей	2. Механизм, обеспечивающий потенциальную возможность излучения фононов
3. В условиях инверсной населенности когерентные фотоны испускаются при переходах частиц с верхнего энергетического уровня на нижний.	3. При определенных условиях (критическая скорость охлаждения, переохлаждение до определенной температуры и др.) происходит переход атомов из решетки высокотемпературной фазы в позиции, определяемые решеткой низкотемпературной равновесной фазы, и одновременно излучаются когерентные фононы.
4. Резонатор	4. Граница кристалла, плоские дефекты, группы точечных дефектов, дислокации и др.
5. Уравнение Максвелла	5. Трехмерное волновое уравнение когерентных фононов.
6. Уравнение Ван-дер-Поля	6. Уравнение Ван-дер-Поля и уравнение Дуффинга

1.5 Физическая постановка задачи

Краткий обзор работ, относящихся в основном к самопроизвольному мартенситному превращению парамагнитного аустенита, показывает, что волновой подход к описанию $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения, будучи перспективным с точки зрения построения микроскопической динамической теории МП, разработан слабо. Прежде всего, необходимо установить механизм генерации (или усиления) волн на стадии роста мартенсита, а затем дать трактовку конкретных кристаллографических признаков мартенсита в волновой схеме, поскольку без такой трактовки волновой подход применительно к задачам материаловедения в значительной мере обесценивается.

1. Будем полагать, что процесс быстрого, за время $t_N \approx (10^{-9} \div$

10^{-10}) с, образования макрозародыша с поперечным размером $2 \cdot r \approx (10^{-6} \div 10^{-7})$ м (см. п. 1.3) реализуется. Нетрудно видеть, что данный постулат является некоторой детализацией предполагаемого обычно начального флуктуационного зарождения. Допустим также, что в поперечном к оси зародыша направлении можно выделить дополнительный к r пространственный масштаб l (см. рис. 1.7), задающий ширину области (обозначим ее $B_{\gamma-\alpha}$), характеризующей значительной неоднородностью таких макропараметров, как температура и химический потенциал электронов μ ², то есть в области $B_{\gamma-\alpha}$ велики значения пространственных градиентов ∇T и $\nabla \mu$.

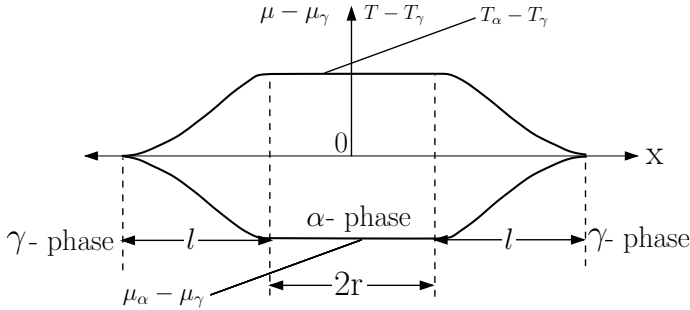


Рис. 1.7. Предполагаемое распределение температуры T и химического потенциала электронов μ в момент образования макрозародыша α -фазы, ось x перпендикулярна оси зародыша

Оценку l получим, считая, что процесс выделения тепла и заметное изменение объема наблюдаются в области, через которую прошел фронт упруго-пластической волны (иницирующей $\gamma - \alpha$ превращение), распространяющейся со скоростью $c \sim 10^3$ м/с от превращающейся за время t_N области: $l \sim c \cdot t_N \sim (10^{-6} \div 10^{-8})$ м (см. также оценку l в п. 6.3.3).

Порядок величин ∇T , $\nabla \mu$ установим из соотношений

$$\nabla T \sim \frac{\Delta T}{l} \approx \frac{T_\alpha - T_\gamma}{l}, \quad \nabla \mu \sim \frac{\Delta \mu}{l} \approx \frac{\mu_\alpha - \mu_\gamma}{l}. \quad (1.7)$$

²Обозначение μ , использованное в п. 1.4 для модуля сдвига, в дальнейшем относится к химическому потенциалу.

Величина ΔT сравнима со степенью переохлаждения $T_0 - M_S$, то есть $\Delta T \sim 100$ К (см. начало п. 1.2), и, значит, $\nabla T \sim (10^8 \div 10^{10})$ К/м. Величину $\Delta\mu$ оценим, учитывая, что вследствие объемного эффекта удельный объем α -фазы растет, а концентрация электронов n и с нею μ уменьшаются. Полагая $\mu \sim n^{\frac{2}{3}}$ (стандартная связь μ и n в модели свободных электронов, см., например, [87]), находим

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = -\frac{2}{3} \frac{\Delta V}{V}. \quad (1.8)$$

При $\Delta V/V \approx 2,4 \cdot 10^{-2}$ - типичное значение изменения объема при деформации Бейна, для $\mu \sim 10$ эВ из (1.8) получаем $\Delta\mu = 0,16$ эВ, что эквивалентно 1860 К по температурной шкале. Таким образом, при одном и том же l величина $\nabla\mu/k_B$, где k_B - постоянная Больцмана, может на порядок превышать ∇T . Отметим, что выполненная на основе учета объемного эффекта оценка $\Delta\mu$, в силу использованной связи $\mu \sim n^{\frac{2}{3}}$ справедлива для подсистемы s-электронов. Разумеется, те же значения могут быть получены и при рассмотрении подсистемы d-электронов (см. п. 4.5).

Значительные ∇T , $\nabla\mu$ обуславливают необходимость рассмотрения электронной и фононной подсистем области $B_{\gamma-\alpha}$ в неравновесных условиях. Подобная конкретизация неравновесных условий позволяет поставить задачу о генерации (или селективном усилении) фононов неравновесными электронами.

- Напомним, что физической основой мазерного эффекта является преобладание стимулированного излучения над поглощением в условиях инверсной населенности состояний излучающей системы (населенность состояний с большей энергией больше, чем с меньшей энергией). Выбирая в качестве излучающей системы коллективизированные электроны и полагая зонное описание справедливым, легко убедиться, что при наличии электронных потоков инверсно населенные состояния

есть всегда. Обозначим $f_{j\mathbf{k}}$ неравновесную функцию распределения электронов в состоянии $(j\mathbf{k})$, где j - номер зоны, $\hbar\mathbf{k}$ - квазиимпульс (\hbar -постоянная Планка) электрона с энергией $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$, и рассмотрим хорошо известные (см., например, [87]) из теории теплопроводности ($\nabla T \neq 0$) и электропроводности ($\nabla\mu \neq 0$) картины неравновесного распределения электронов. На рис. 1.8 приведены равновесная $f_{\mathbf{k}}^0$ (сплошная линия) и неравновесная $f_{\mathbf{k}}$ (пунктирная линия) функции в случаях, когда степень неравновесности определяется величинами ∇T (рис. 1.8а) и $\nabla\mu$ (рис. 1.8б). В случае а), очевидно, возникает два встречных потока электронов (электроны с энергией $\varepsilon > \mu$ движутся из области горячей в более холодную, то есть против направления градиента температуры, а электроны с $\varepsilon < \mu$ движутся параллельно ∇T). В результате, при квазиимпульсах электронов $\hbar\mathbf{k}$ антипараллельных ∇T , неравновесная добавка $\Delta f_{\mathbf{k}} > 0$ для $\varepsilon_{\mathbf{k}} > \mu$, и $\Delta f_{\mathbf{k}} < 0$ для $\varepsilon_{\mathbf{k}} < \mu$. Наоборот, при \mathbf{k} параллельных ∇T , $\Delta f_{\mathbf{k}} > 0$ для $\varepsilon_{\mathbf{k}} < \mu$, и $\Delta f_{\mathbf{k}} < 0$, если $\varepsilon_{\mathbf{k}} > \mu$. Но тогда над (или под) уровнем Ферми инверсно населены состояния с антипараллельными квазиимпульсами против и вдоль (вдоль и против) ∇T . На рис. 1.8а горизонтальными тонкими линиями отмечены уровни населенностей двух инверсно населенных состояний над уровнем Ферми. В случае рис. 1.8б имеется однонаправленное движение электронов в сторону меньшего значения химического потенциала, то есть против $\nabla\mu$, и знак неравновесной добавки к $f_{\mathbf{k}}^0$ не зависит от соотношения $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и μ : $\Delta f_{\mathbf{k}} > 0$ при $\mathbf{k} \uparrow\downarrow \nabla\mu$, $\Delta f_{\mathbf{k}} < 0$ при $\mathbf{k} \uparrow\uparrow \nabla\mu$. Данная трактовка инверсно населенных состояний применительно к неравновесным условиям на стадии роста α -фазы была предложена в [88–90].

3. Рассмотрение задачи о генерации упругих волн неравновесными электронами целесообразно начать с установления условий, необходимых для возбуждения (или усиления) плоской волны смещений атомов в случае бесконечного кристалла с однородными и стационарными градиентами температуры или химического потенциала.

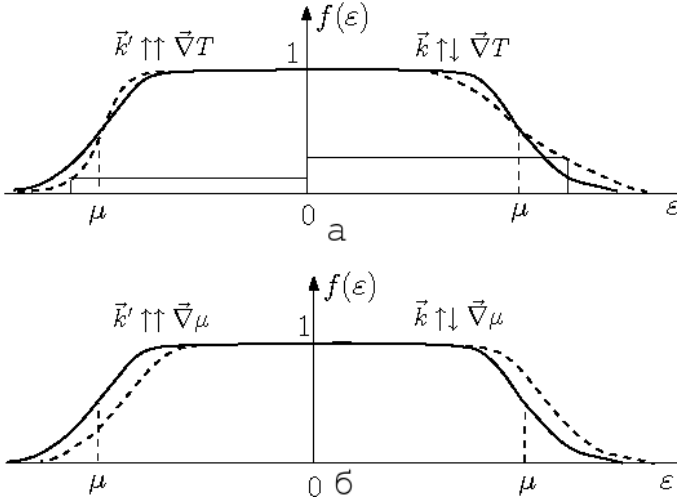


Рис. 1.8. Равновесные (сплошные линии) и неравновесные (штриховые линии) функции распределения электронов: (а): $\nabla T \neq 0$; (б) $\nabla \mu \neq 0$

Плоская волна смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_0 \cos(\omega_{\mathbf{q}} t - \mathbf{q} \mathbf{r})$ с квантовой точки зрения представляет макроскопическую совокупность когерентных фононов с энергиями $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ и волновыми векторами \mathbf{q} . Это означает, что лазерный механизм генерации волны возможен, если имеется макроскопическое число пар инверсно населенных электронных состояний $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, при переходах между которыми происходит преимущественно излучение фононов, причем выполняются законы сохранения энергии и квазиимпульса:

$$\varepsilon_{i\mathbf{k}} - \varepsilon_{i'\mathbf{k}'} = \omega_{j\mathbf{q}}, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q} = 0, \quad \hbar \mathbf{Q}. \quad (1.10)$$

Здесь j - индекс фононной ветви, а равенство нулю или вектору обратной решетки \mathbf{Q} в (1.10) зависит от того, относятся ли электронные переходы к нормальным N-процессам или к U-процессам переброса [87] (см. рис. 1.9). Таким образом, возникает задача об отыскании в \mathbf{k} -пространстве макроскопических

наборов пар инверсно населенных состояний, эквидистантных в смысле выполнения соотношений (1.9, 1.10). Руководящей

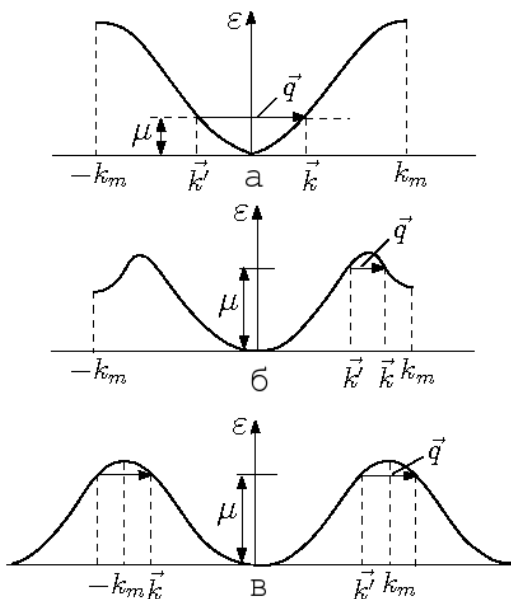


Рис. 1.9. Одномерная схема нормальных N-процессов (случаи а, б) и процессов переброса U (случай в): k_m - граничный импульс первой зоны Бриллюэна, \mathbf{q} - импульс фонона, разлчие энергий $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и $\varepsilon_{\mathbf{k}'}$ не учитывается, μ - уровень Ферми

идеей при решении задачи является классификация пар состояний с помощью точек поверхности, разделяющей в \mathbf{k} -пространстве инверсно населенные состояния. Важно, что уже на этом этапе анализа можно провести предварительный отбор нестабильных в неравновесных условиях колебаний решетки. В монографии подобный анализ проводится для энергетического спектра электронов железа с ГЦК решеткой, то есть предполагается, что структура электронного спектра в области $B_{\gamma-\alpha}$ сохраняет основные особенности электронного спектра ГЦК - модификации железа, важные с точки зрения реализации механизма генерации фононов.

Отметим, что за исключением специфики неравновесной задачи по существу та же особенность электронного спектра - макроскопичность числа пар электронных состояний, удовлетворяющих (1.9, 1.10), используется при трактовке пайерлсовской неустойчивости трехмерной решетки, электронных и магнитных фазовых переходов в рамках концепций волн зарядовой и спиновой плотности [4, 91–94]. Действительно, в перечисленных примерах требуется существование на поверхности Ферми более или менее обширных участков, совмещающихся при трансляции на некоторый вектор \mathbf{q} , который и характеризует образующуюся структуру. Наличие подобных особенностей должно проявляться в существовании пиков плотности состояний электронов в окрестности энергии Ферми [95–97]. Разумеется, и интересующие нас пары электронных состояний должны иметь энергии вблизи значения μ .

4. По аналогии со случаем фотонного лазера [98] следует ожидать, что достаточным для реализации фонованного лазера является выполнение порогового условия

$$\sigma_0 > \sigma_{th} = \frac{\Gamma \kappa}{|W|^2 R}, \quad (1.11)$$

учитывающего, что начальная инверсная разность населенностей σ_0 должна превысить определенное пороговое значение σ_{th} , пропорциональное затуханиям излучающих электронов Γ , генерируемых фононов κ и обратно пропорциональное квадрату матричного элемента W -электрон-фононного взаимодействия и числу пар эквидистантных электронных состояний R . Отметим, что значительное затухание κ дебаевских фононов делает их неконкурентоспособными, согласно (1.11), по сравнению с более длинноволновыми фононами, поэтому предложенный в [82] дебаевский диапазон частот генерируемых фононов представляется маловероятным.

5. Следует различать динамическую неустойчивость, выражающуюся в возбуждении упругих волн при выполнении (1.11), и

структурную неустойчивость, возникающую (см. п. 1.3), когда амплитуды волн достигают пороговых значений, достаточных для начала пластической деформации $\varepsilon_{th} \sim 10^{-3}$. То есть, для реализации интересующей нас структурной неустойчивости необходимо выполнение более жесткого, чем (1.11), условия.

6. Поскольку $\gamma - \alpha$ мартенситное превращение в сплавах на основе железа протекает в широком диапазоне концентраций другого (других) компонента (компонентов), значительно изменяя температуру M_S (в системе Fe - Ni от $M_S < 10^3$ К при малом содержании Ni до $M_S < 4,2$ К при 34% Ni), требуется специальное обоснование возможности эффективного функционирования лазерного механизма генерации в широком диапазоне изменения концентраций и температур. Возникающие при этом трудности удастся преодолеть в двухзонной (s, d) модели электронного спектра металла (более развернутая постановка задачи дается в п. 4.1).
7. Обосновав модель фононного лазера для отдельных волн, следует перейти к трактовке морфологических признаков. В качестве базового признака удобно выбрать габитусную плоскость, поскольку с ней, как отмечалось в п. 1.2, однозначно связан единственный путь мартенситной реакции. Ключевую роль при интерпретации играет следующая геометрическая картина: всякую плоскость можно рассматривать как геометрическое место точек, „заметаемое“ движущейся плоской линией, в частности, прямой линией (аналогично линию можно рассматривать как результат движения точки). Следующий шаг заключается в отождествлении движущейся линии с линией пересечения фронтов двух бегущих плоских волн с неколлинеарными волновыми векторами (мысль об использовании комбинаций волн высказывалась в [81]). Дальнейшая конкретизация касается типов волн, направлений их распространения и фазовых соотношений, благоприятных для превращения. Применительно к $\gamma - \alpha$ МП выбираются продольные (или квазипродольные) волны, бегущие вблизи

ортогональных направлений $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и, в соответствии со схемой бейновской деформации (см. рис. 1.1), принимается, что формирование пластины мартенсита происходит за счет присоединения областей, испытывающих синхронное растяжение и сжатие, обусловленное распространяющимися волнами. На рис. 1.10 ортогональные направления распространения обозначены цифрами 1 и 2 и, соответственно, скорости и длины волн \mathbf{c}_1 , \mathbf{c}_2 , λ_1 , λ_2 ; штриховкой указаны поперечные сечения областей с благоприятными для превращения направлениями напряжений сжатия (в направлении 1) и растяжения (в направлении 2) в начальный момент времени t_0 и некоторый последующий момент t . Очевидно, что область, заключенная между жирными линиями, представляет собой сечение пластины с толщиной порядка $(1/2)\lambda_{1,2}$, являющейся прообразом пластины мартенсита. Легко понять также, что заштрихованная область наложения волн, как и линия пересечения фронтов волн, движется со скоростью, равной геометрической сумме скоростей $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ ³

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2, \quad c = |\mathbf{c}| = \sqrt{c_1^2 + c_2^2}. \quad (1.12)$$

Поскольку значение $|\mathbf{c}|$, с одной стороны, может характеризовать торцевую скорость роста пластины мартенсита, а с другой стороны, превышать скорость продольного звука в направлении \mathbf{c} , возникает принципиальная возможность трактовки направленного (управляемого парой волн продольных смещений) сверхзвукового роста кристаллов мартенсита, то есть объяснения важной кинетической особенности стадии роста. По существу, данная интерпретация впервые использована в [99] (напомним, что ведущая роль продольных волн в формировании мидриба постулировалась также в [77]). Связав типы генерируемых волн как с особенностями электронного спектра, так и с морфологией конечного продукта превращения, можно привести новые соображения для объяснения смены структурно-кинетических особенностей МП (при

³В случае неортогональности \mathbf{c}_1 , \mathbf{c}_2 скорость $|\mathbf{c}|$ отличается от (1.12).

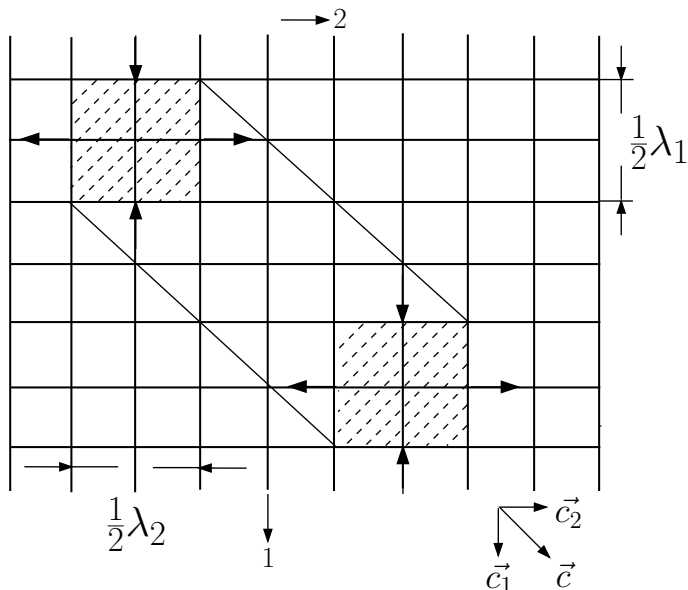


Рис. 1.10. Описание прообраза пластины мартенсита в схеме двух плоских волн, распространяющихся в ортогональных направлениях: \vec{c}_1, \vec{c}_2 - скорости, а λ_1, λ_2 - длины волн

изменении концентрации второго компонента), дополняющие выводы термодинамического анализа.

8. Убедившись, в „работоспособности“ двухволновой схемы, целесообразно рассмотреть вопрос о согласованном распространении волн смещений с волнами переключения - уединенными фронтами ступенчатого вида для температуры (химического потенциала) и деформации, то есть вопрос о движении границы мартенситного кристалла.

Решению задач, поставленных в пунктах 3 ÷ 8 п. 1.5, в основном, и посвящены последующие главы. Говоря кратко, цель работы состоит в том, чтобы рассмотреть стадию роста кристалла мартенсита при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах на основе железа как процесс самоорганизации, ведущую роль в котором играет механизм генерации (усиления) волн

смещений решетки неравновесными электронами.

Во избежание недоразумений при чтении монографии, следует иметь в виду, что одной и той же буквой могут быть обозначены разные физические величины, поэтому необходимо обращать внимание на дополнительную индексацию к буквам и „локальное“ (в тексте) определение величины. Так, например, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ - обозначает энергию электрона с волновым вектором \mathbf{k} , ε - линейную, а $\tilde{\varepsilon}$ - объемную относительные деформации. Векторным величинам соответствуют либо буквы жирного шрифта, либо буквы со стрелками.

Глава 2

Особенности зонного спектра электронов, необходимые для реализации фононного мазера

2.1 Гамильтониан задачи

В соответствии с обсуждением, проведенным в пунктах 1, 2 п. 1.5, будем нумеровать состояние электрона индексом зоны j и волновым вектором \mathbf{k} . Полагаем также, что зонная структура γ -железа сохраняет свои характерные черты и в сплавах на основе железа с ГЦК решеткой, хотя бы в приближении когерентного потенциала [100, 101] (см. также [102]). Тогда в качестве первого шага представляется естественным исследовать динамику электрон-фононной системы в неравновесных условиях в рамках зонной картины энергетического спектра электронов и фононов. Гамильтонианы невзаимодействующих электронов H_e и фононов H_p выбираем в стандартном виде

$$H_e = \sum_{j\mathbf{k}} \varepsilon_{j\mathbf{k}} a_{j\mathbf{k}}^+ a_{j\mathbf{k}}, \quad (2.1)$$

$$H_p = \sum_{i\mathbf{q}} \hbar \omega_{i\mathbf{q}} (b_{i\mathbf{q}}^+ b_{i\mathbf{q}} + \frac{1}{2}), \quad (2.2)$$

где $a_{j\mathbf{k}}^+$, $a_{j\mathbf{k}}$, $b_{i\mathbf{q}}^+$, $b_{i\mathbf{q}}$ - операторы рождения и уничтожения для электронов и фононов, соответственно, индекс $i = 1, 2, 3$ нумерует акустические ветви фононного спектра с частотами ω и волновыми

векторами \mathbf{q} . Поскольку при взаимодействии электронов с фононами наиболее вероятны процессы с участием одного фонона, в качестве гамильтониана взаимодействия H_{ep} принимаем гамильтониан Фрелиха линейный по операторам b^+ и b :

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{q} \mathbf{k} \mathbf{j} \mathbf{j}'} W_{\mathbf{q} \mathbf{j} \mathbf{j}'}^* b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{j} \mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{j}' \mathbf{k}'} + W_{\mathbf{q} \mathbf{j} \mathbf{j}'} b_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{j}' \mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{j} \mathbf{k}}, \quad (2.3)$$

где квазиимпульсы удовлетворяют закону сохранения (1.10), $W_{\mathbf{q}}$ матричный элемент электрон-фононного взаимодействия ($W_{\mathbf{q}}^*$ комплексно сопряжен с $W_{\mathbf{q}}$). Оценочное выражение для $W_{\mathbf{q}}$ в приближении сильной связи получают, ограничиваясь линейным по смещениям атомов разложением резонансного интеграла G , величина которого определяет ширину электронной зоны [92]. Для q , малых по сравнению с q_{\max} на границе первой зоны Бриллюэна $q_{\max} \sim \pi/a$, как при нормальных N , так и при U - процессах, имеем

$$W_{\mathbf{q}} \approx i \left[\frac{\hbar}{2 M N \omega_{\mathbf{q}}} \right]^{\frac{1}{2}} G(\mathbf{e}_{\mathbf{q}}, \mathbf{q}), \quad (2.4)$$

где M - масса атома; N - число атомов; $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ - вектор поляризации фонона; i - мнимая единица (мы опустили в (2.4) индексы зон и ветвей).

Помимо гамильтонианов (2.1)-(2.3) полный гамильтониан H системы учитывает еще взаимодействия электронов друг с другом H_{ee} и ангармоническое взаимодействие фононов H_{pp} , явный вид которых нами дальше не используется.

2.2 Вид неравновесной добавки к электронной функции распределения. Точки, разделяющие инверсно населенные состояния одномерного электронного спектра

Задача отбора пар электронных состояний (ЭС), потенциально активных в генерации (см. пункт 3 в п. 1.5), требует выполнения

наряду с (1.9, 1.10) дополнительных условий. Прежде всего отметим, что термин „потенциально активные“ означает инверсию населенностей пар ЭС в неравновесных условиях. Поскольку инверсия населенностей реализуется при наличии потоков электронов, максимальная инверсия должна достигаться для пар ЭС с противоположными, по отношению к направлению пространственной неоднородности, направлениями групповых скоростей $\mathbf{v}_\mathbf{k} \uparrow \downarrow \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}$ электронов с волновыми векторами \mathbf{k}, \mathbf{k}' .

В справедливости сказанного легко убедиться, выписывая стационарные неравновесные добавки $f_\mathbf{k} - f_\mathbf{k}^0$ (для стационарных и однородных градиентов температуры и химического потенциала), получаемые из стандартных кинетических уравнений для населенностей электронов $f_\mathbf{k}$ в приближении времени релаксации [87], основанном на замене интеграла столкновений выражением $(f - f^0)\tau^{-1}$, где τ - время релаксации к равновесному распределению f^0

$$f_\mathbf{k} - f_\mathbf{k}^0 \approx \frac{\partial f_\mathbf{k}^0}{\partial y_\mathbf{k}} \frac{y_\mathbf{k} \tau}{T} (\mathbf{v}_\mathbf{k}, \vec{\nabla} T), \quad (2.5)$$

$$f_\mathbf{k} - f_\mathbf{k}^0 \approx \frac{\partial f_\mathbf{k}^0}{\partial y_\mathbf{k}} \frac{\tau}{k_B T} (\mathbf{v}_\mathbf{k}, \vec{\nabla} \mu). \quad (2.6)$$

В (2.5) и (2.6) $f_\mathbf{k}^0$ - функция распределения Ферми

$$f_\mathbf{k}^0 = \frac{1}{\exp(y_\mathbf{k}) + 1}, \quad y_\mathbf{k} = \frac{\varepsilon_\mathbf{k} - \mu}{k_B T}, \quad (2.7)$$

k_B -константа Больцмана.

Из (2.5) и (2.6) следует, что неравновесная добавка меняет знак при изменении направления $\mathbf{v}_\mathbf{k}$ на противоположное, поскольку меняет знак скалярное произведение $(\mathbf{v}_\mathbf{k}, \vec{\nabla} T)$ либо $(\mathbf{v}_\mathbf{k}, \vec{\nabla} \mu)$.

Учитывая, что $\partial f_\mathbf{k}^0 / \partial y_\mathbf{k} < 0$, легко установить соответствие между выражениями (2.5), (2.6) и рис. 1.8. Требование $\mathbf{v}_\mathbf{k} \uparrow \downarrow \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}$ является более общим, чем отмеченное в пункте 2 п. 1.5 условие антипараллельности квазиимпульсов $\hbar \mathbf{k} \uparrow \downarrow \hbar \mathbf{k}'$ пары ЭС. Действительно, требование $\mathbf{k} \uparrow \downarrow \mathbf{k}'$ выполняется для N - и U - процессов вблизи дна и потолка энергетической зоны (случаи а), в) на рис.

1.9), но не выполняется, если N - процесс происходит в окрестности точки общего положения (случай б) на рис. 1.9), тогда как требование $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \uparrow \downarrow \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}$, выполняется для всех случаев. Из рассмотрения одномерного спектра рис. 1.9 очевидно, что противоположные направления скоростей имеют пары ЭС, разделенные точкой, нумеруемой квазиимпульсом \mathbf{p} , в которой зависимость $\varepsilon(\mathbf{k})$ имеет экстремум, и, значит, групповая скорость

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \Big|_{\mathbf{p}}$$

обращается в нуль ($\mathbf{p} = 0$ - случай а), $\mathbf{p} = \mathbf{k}_m$ - случай б), $0 < \mathbf{p} < \mathbf{k}_m$ случай в)). Таким образом, отбор пар ЭС в одномерном \mathbf{k} - пространстве удобно вести, находя точки \mathbf{p} с равновесной населенностью, разделяющие состояния \mathbf{k}, \mathbf{k}' пары ЭС.

2.3 Поверхности, разделяющие инверсно населенные состояния трехмерного электронного спектра

Обобщим результаты предыдущего п. 2.2 на случай трехмерного спектра электронов. Обозначим $R(\mathbf{q}) = \{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}'\rangle\}$ наборы пар эквидистантных, в смысле выполнения соотношений (1.9, 1.10), пар ЭС, потенциально активных в генерации фононов с квазиимпульсом $\hbar\mathbf{q}$. Как обсуждалось в пункте 3 п. 1.5, вклад индуцированных излучательных переходов между ЭС из некоторого набора $R = \{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}'\rangle\}$ может стать макроскопическим, если макроскопическим является число пар ЭС в R и для большинства пар обеспечена инверсия населенностей (имеются в виду внутризонные переходы, поэтому индексы зон опускаются). В случае пространственно-неоднородного распределения электронов инверсия населенностей (ИН) возможна для пар ЭС с антипараллельными составляющими скоростей $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \vec{\nabla} \varepsilon$ вдоль некоторого направления. Этому требованию удовлетворяют, в частности, ЭС, разделяемые в \mathbf{k} -пространстве поверхностями P , на которых

$$(\mathbf{v}(\mathbf{k}), \mathbf{n}(\mathbf{k})) = 0, \quad (2.8)$$

где $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ - единичный вектор нормали к данной поверхности P в точке \mathbf{k} . С каждой из поверхностей P можно связать совокупность пар ЭС, локализованных вблизи нее в слое толщиной $\sim q$ (предполагается, что $q \sim (10^{-3} \div 10^{-1})\pi/a$, a - параметр решетки) и имеющих антипараллельные составляющие скоростей вдоль \mathbf{n} . Не всякая поверхность P , однако, определяет такой набор пар ЭС, который совместим и с требованием макроскопичности числа инверсно населенных пар, и с условиями (1.9, 1.10). Действительно, при заданном направлении пространственной неоднородности (обозначим его \mathbf{e}) ИН безусловно возможна для пар ЭС вблизи точек поверхности P , в которых \mathbf{n} коллинеарен \mathbf{e} (или \mathbf{e} и \mathbf{n} лежат в плоскости, перпендикулярной к \mathbf{v}), поскольку в q -окрестности таких точек имеются состояния с антипараллельными составляющими скоростей вдоль \mathbf{e} . Число этих точек зависит от формы поверхности P и будет, очевидно, наибольшим в случае плоскости. Поэтому среди поверхностей P выделенными оказываются прежде всего плоскости, для которых $\mathbf{n} = \text{const}$.

Плоскость P , по определению, это такая плоскость, во всех точках которой составляющая скорости \mathbf{v} вдоль направления нормали к плоскости равна нулю. Очевидно, что этому определению отвечают плоскости, совпадающие с плоскостями симметрии обратной решетки. Действительно, при отражении в плоскости нормальная к ней составляющая скорости меняет знак, следовательно, в точках на плоскости симметрии скорость \mathbf{v} , будучи инвариантом относительно операции отражения в плоскости симметрии, не может иметь отличной от нуля составляющей в направлении нормали к этой плоскости.

Соображения симметрии не исключают, конечно, возможности существования плоскостей P , не совпадающих с плоскостями симметрии. Поэтому необходимо найти уравнения, позволяющие, при известном законе дисперсии, установить и те из плоскостей P , которые не следуют из симметрии. Заметим, что если поверхность P

-плоскость, то в ее точках должны выполняться равенства (2.8) и

$$(\mathbf{n}, d\mathbf{v})|_P = (\mathbf{n}, (d\mathbf{k}, \vec{\nabla})\mathbf{v})|_P = 0, \quad (2.9)$$

где $d\mathbf{k}$ удовлетворяет требованию $(d\mathbf{k}, \mathbf{n}) = 0$. В плоскости P можно задать два линейно независимых вектора $d\mathbf{k}$: $d\mathbf{k} = d\mathbf{k}_1$, $d\mathbf{k} = d\mathbf{k}_2$. Полагая для определенности $d\mathbf{k}_1 = [\mathbf{n}, \mathbf{v}]|_P dl$ и $d\mathbf{k}_2 = \mathbf{v}|_P dl$, из (2.9) получим

$$(\mathbf{n}, ([\mathbf{n}, \mathbf{v}]\vec{\nabla})\mathbf{v})|_P = 0, \quad (\mathbf{n}, (\mathbf{v}, \vec{\nabla})\mathbf{v})|_P = 0. \quad (2.10)$$

Записывая уравнение P -плоскости в виде $(\mathbf{n}, \mathbf{k}) = C$, вектор нормали \mathbf{n} и константу C можно найти, разрешая (2.8) и (2.10) относительно компонент вектора \mathbf{n} и C при некотором $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, удовлетворяющем условию $\mathbf{v}(\mathbf{k}_0) \neq 0$. Вектор \mathbf{k}_0 , определяющий точку на плоскости P , имеет две независимые компоненты, выбираемые произвольно; практически удобно взять \mathbf{k}_0 таким, чтобы уравнения (2.8), (2.10) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ имели наиболее простой вид.

В случае кривой поверхности P вектор нормали к ней и вектор скорости при переходе от точки к точке изменяют свою ориентацию по отношению к \mathbf{e} , и число пар ЭС с антипараллельными составляющими скоростей вдоль \mathbf{e} в \mathbf{q} -слое, содержащем поверхность P , может оказаться малым. Напротив, с точки зрения инверсии населенностей выделяются именно пары ЭС с антипараллельными составляющими скоростей вдоль направления, определяемого направлением пространственной неоднородности \mathbf{e} . В \mathbf{k} - пространстве такие пары состояний разделяются поверхностями другого типа (обозначим их S), на которых

$$(\mathbf{v}, \mathbf{e}) = 0, \quad (2.11)$$

то есть скорость \mathbf{v} во всех точках поверхности S имеет нулевую проекцию на \mathbf{e} . Согласно (2.11), поверхность S представляет собой геометрическое место особых точек (экстремумы и точки перегиба) функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ при изменении \mathbf{k} в направлении \mathbf{e} . Очевидно, что для каждой пары точек \mathbf{k}, \mathbf{k}' , расположенных по разные стороны от S вблизи S ($|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \leq 0, 1\pi/a$) скалярные произведения

$(\mathbf{v}(\mathbf{k}), \mathbf{e}), (\mathbf{v}(\mathbf{k}'), \mathbf{e})$ будут иметь разные знаки, если точка пересечения вектора $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ с поверхностью S отвечает экстремуму функции $\varepsilon(\mathbf{k})$, то есть при $(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \vec{\nabla})\mathbf{v}|_S \neq 0$. Если же $(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \vec{\nabla})\mathbf{v}|_S = 0$ (точка перегиба функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ на поверхности S), то смены знака $(\mathbf{v}(\mathbf{k}), \mathbf{e})$ при пересечении S не произойдет, и соответствующую пару состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' следует исключить из рассмотрения.

Уравнения поверхностей S можно представить в форме, не зависящей явно от \mathbf{e} . Подобную форму целесообразно использовать при поиске поверхностей S , обладающих некоторыми специальными свойствами; при этом векторы \mathbf{e} не задаются с самого начала, а находятся уже по известным уравнениям поверхностей S . Заметим, что, согласно (2.11), во всех точках поверхности S векторы скорости параллельны фиксированной плоскости. Поэтому для любых трех точек поверхности S , определяемых векторами $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$, имеем

$$(\mathbf{v}(\mathbf{k}), [\mathbf{v}(\mathbf{k}_1), \mathbf{v}(\mathbf{k}_2)]) = 0. \quad (2.12)$$

Полагая $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}'$, разложим (2.12) по степеням $\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}'$, ограничиваясь линейными членами при разложении $\mathbf{v}(\mathbf{k}_1), \mathbf{v}(\mathbf{k}_2)$, что дает

$$(\mathbf{W}(\mathbf{k}), [\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}']) \approx 0, \quad (2.13)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} \sum_{ijn} \mathbf{e}_i \varepsilon_{ijn} \left(\mathbf{v}, \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial k_j}, \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial k_n} \right] \right), \quad (2.14)$$

$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ - орты правой декартовой системы координат, $\varepsilon_{ijn} = (\mathbf{e}_i, [\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_n])$. При $\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}' \rightarrow 0$ вектор $[\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}']$ занимает положение нормали \mathbf{n} к поверхности S в точке \mathbf{k} . Поэтому после предельного перехода $\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}' \rightarrow 0$ в (2.13) вектор $[\Delta\mathbf{k}, \Delta\mathbf{k}']$ можно заменить на \mathbf{n} . В результате получаем искомое уравнение для поверхностей

$$(\mathbf{W}(\mathbf{k}), \mathbf{n}(\mathbf{k})) = 0. \quad (2.15)$$

Используем уравнение S - поверхностей в форме (2.15) для отыскания плоских поверхностей S . Задача отыскания плоскостей в слу-

чае векторного поля $\mathbf{W}(\mathbf{k})$ формально эквивалентна задаче отыскания плоскостей P для поля скоростей $\mathbf{W}(\mathbf{k})$, поскольку уравнения (2.8) и (2.15), определяющие поверхности P и S , одинаковы. Ее решение сводится к решению тех же самых уравнений (2.8), (2.10), в которых только \mathbf{v} заменяется на \mathbf{W} . Для иллюстрации рассмотрим ГЦК кубическую решетку. Базисные векторы прямой и обратной решеток зададим так же, как в [103], и возьмем простейший закон дисперсии в приближении сильной связи [104]:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - 2\varepsilon_1 \sum_{ij} (1 - \delta_{ij}) \cos \eta_i \cos \eta_j, \quad (2.16)$$

где $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ - постоянные, $\eta_i = (ak_i/2)$, a - постоянная решетки. Множество плоскостей P в этом случае исчерпывается плоскостями симметрии: $k_i = 2m_i(\pi/a)$, $k_i \pm k_j = 4m_{ij}(\pi/a)$, $i \neq j$, $i, j = 1, 2, 3$; $m_i, m_{ij} = 0, \pm 1, \dots$. При отыскании S -плоскостей удобно различать случаи плоскостей: 1) параллельных координатным плоскостям или осям; 2) пересекающих все координатные оси. Плоскости, параллельные координатным плоскостям, определяются уравнениями $k_i = c_i$, $i = 1, 2, 3$. Постоянные c_i находим из уравнений

$$(\mathbf{n}, \mathbf{W})_{k_i=c_i, k_j=k_l=0} = 2B \sin\left(\frac{1}{2}c_i a\right)(1 + \cos\frac{1}{2}c_i a)^2, \quad (2.17)$$

где $B = 2a^5 \hbar^{-3} \varepsilon_1^3$, которые удовлетворяются при $c_i = 2m_i\pi/a$, $m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Плоскость, параллельная координатной оси, например оси k_3 , определяется уравнением $n_1 k_1 + n_2 k_2 = c_{12}$. Известные n_1, n_2 и c_{12} находим из уравнений

$$(\mathbf{n}, \mathbf{W})|_{k_3=0} = 32 B D^2 K (n_1 \sin \eta_1 + n_2 \sin \eta_2) = 0, \quad (2.18)$$

$$(\mathbf{n}, (\mathbf{W}, \vec{\nabla}) \mathbf{W})|_{k_3=0} = 32 a B^2 D^4 K \{n_1 \sin \eta_1 [K (\cos \eta_1 + K - 2) - \sin^2 \eta_1 - \sin^2 \eta_2] + (1 \rightleftharpoons 2)\} = 0 \quad (2.19)$$

где

$$D = \cos \frac{1}{2} \eta_1 \cos \frac{1}{2} \eta_2, \quad K = \frac{1}{2} \cos \frac{1}{2} (\eta_1 + \eta_2) \cos \frac{1}{2} (\eta_1 - \eta_2).$$

Множитель $K = 0$, если $k_1 \pm k_2 = 2(2m + 1)\pi/a$, $m = 0, \pm 1, \dots$. Равенство нулю последнего сомножителя в (2.18) возможно, в чем нетрудно убедиться, лишь при $|n_1| = |n_2|$. Уравнения плоскостей, пересекающих все координатные оси: $k_1 \pm k_2 \pm k_3 = 4\pi m/a$ можно предположить сразу, учитывая, что отрезки, отсекаемые такими плоскостями на координатных осях, согласно уравнениям (2.17), (2.18), (2.19), равны по величине. Однако условие (2.15) на этих плоскостях не выполняется, и, значит, они не являются S-плоскостями.

Требование максимальности ИН, выделяющее плоские поверхности S, не является единственным и на его основе нельзя исключать из рассмотрения кривые поверхности S. Уравнения этих поверхностей можно найти из (2.11), задаваясь определенными \mathbf{e} . Каждому \mathbf{e} отвечает многолистная поверхность S, форма ее изменяется при изменении \mathbf{e} . Для спектра (2.16) представление об изменении формы поверхностей S можно получить, задавая \mathbf{e} вдоль осей симметрии. При $\mathbf{e} \parallel [001]$ (ось четвертого порядка), $\mathbf{e} \parallel [111]$ (ось третьего порядка), $\mathbf{e} \parallel [110]$ (ось второго порядка) уравнения S-поверхностей имеют вид:

$$S_{[001]} : \sin(\eta_3) \cos \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2) \cos \frac{1}{2}(\eta_1 - \eta_2) = 0, \quad (2.20)$$

$$S_{[111]} : \sin(\eta_1 + \eta_2) + \sin(\eta_1 + \eta_3) + \sin(\eta_2 + \eta_3) = 0, \quad (2.21)$$

$$S_{[110]} : \sin \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2) [\cos \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2) + \cos \frac{1}{2}(\eta_1 - \eta_2) \cos(\eta_3)] = 0. \quad (2.22)$$

Вид некоторых из листов поверхностей (2.20) - (2.22) в пределах первой зоны Бриллюэна (ПЗБ) приведен на рис. 2.1 - 2.3 (ниже часть листа S-поверхности внутри ПЗБ называется приведенным листом).

При $\mathbf{e} \parallel [001]$ уравнение (2.20) описывает совокупность плоскостей:

$$\eta_3 = m\pi \rightarrow k_3 = 2m\pi/a, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.23)$$

$$\eta_1 \pm \eta_2 = (2m + 1)\pi \rightarrow k_1 \pm k_2 = 2(2m + 1)\pi/a. \quad (2.24)$$

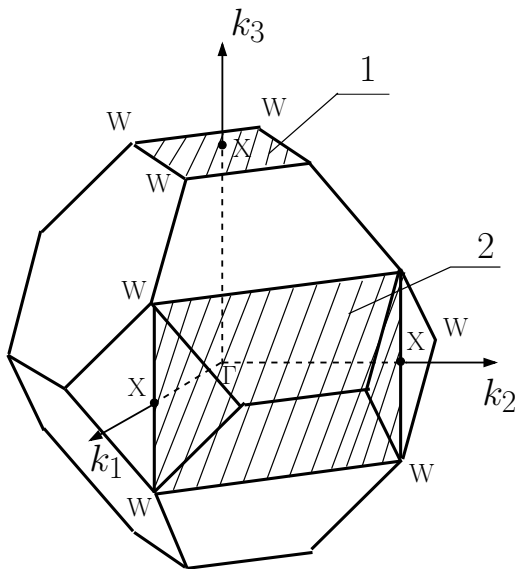


Рис. 2.1. Вид приведенных листов поверхности $S_{[001]}$ в случае закона дисперсии (2.16); листы 1 и 2 определяются соответственно уравнениями: $k_3 = 2\pi/a$, $k_1 + k_2 = 2\pi/a$, где a - параметр ГЦК - решетки

На рис. 2.1 заштрихованная квадратная грань зоны Бриллюэна (лист 1) соответствует плоскости (2.23) при $m = 1$ (противоположащей квадратной грани отвечает $m = -1$, а плоскому участку, проходящему через точку Γ - $m = 0$); вертикальный заштрихованный прямоугольник (лист 2) соответствует одной из четырех плоскостей вида (2.24) при $m = 0$: $k_1 \pm k_2 = 2\pi/a$.

При $\mathbf{e} \parallel [111]$ все листы поверхности (2.21) кривые. На рис. 2.2 изображен один из трех приведенных листов (аналогичный по фор-

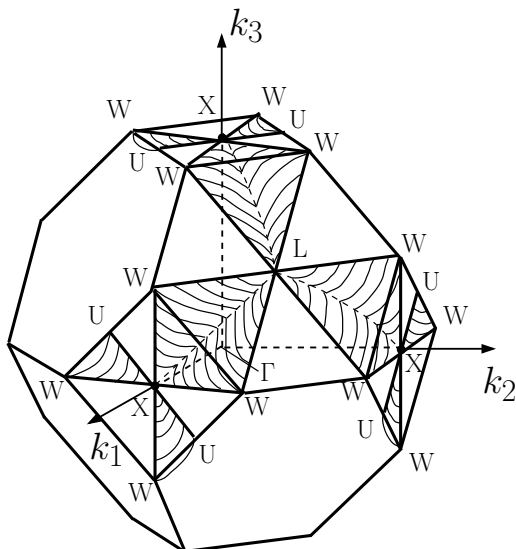


Рис. 2.2. Вид одного из приведенных кривых листов поверхности $S_{[111]}$ в случае закона дисперсии (2.16)

ме лист может быть получен операцией инверсии относительно точки Γ). Не изображен лист, проходящий через точку Γ .

При $\mathbf{e} \parallel [110]$ наряду с S-плоскостями $k_1 + k_2 = 4\pi m/a$ (приведенному плоскому листу отвечает $m = 0$) уравнению (2.22) удовлетворяют (при обращении в нуль выражения в квадратных скобках в (2.22)) кривые S-поверхности. На рис. 2.3 изображен один из двух приведенных кривых листов (второй получается операцией инверсии).

Рис. 2.4, на котором изображены сечения S-поверхностей (в том числе и неизображенных на рис. 2.1 - 2.3) при $\mathbf{e} \parallel [11\psi]$ плоскостью $k_1 = k_2$, позволяет проследить, каким образом происходит их непрерывная трансформация при изменении \mathbf{e} . В случае $\psi \gg 1$ следы поверхностей имеют ступенчатый вид с выраженными линейными (почти вертикальными и горизонтальными) участками, которые в случае $\psi \rightarrow \infty$ перейдут в семейства ортогональных прямых - следов плоскостей (2.20). Наиболее сильное изменение

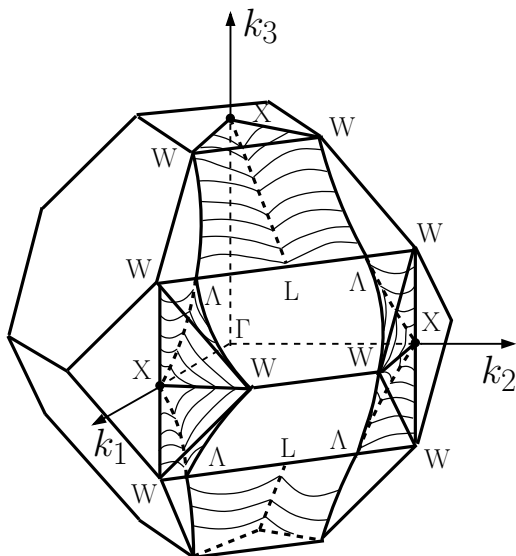


Рис. 2.3. Вид одного из приведенных кривых листов поверхности $S_{[110]}$ в случае закона дисперсии (2.16)

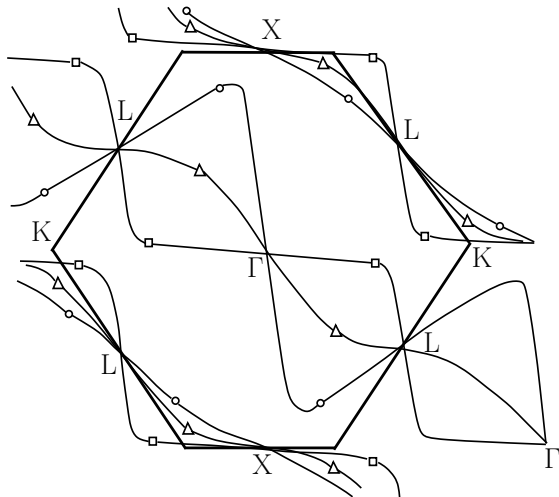


Рис. 2.4. Вид сечения поверхностей $S_{[11\psi]}$ в случае закона дисперсии (2.16) плоскостью $k_1 = k_2$: \square — $\psi \gg 1$, \triangle — $\psi = 1$, \circ — $\psi < 1$

претерпевает след листа S-поверхности, проходящей через точку Г, меняющийся от почти горизонтального отрезка, при $\psi \gg 1$, до почти вертикального, при $0 < \psi \ll 1$ (при $\psi = 0$ вертикальная линия будет следом плоскости $k_1 = -k_2$, удовлетворяющей уравнению (2.22)). И использованные на рис. 2.4 для отличия следов знаки (четырёхугольники, треугольники и эллипсы) указывают на близость \mathbf{e} к осям симметрии, соответственно, четвертого ($\psi \gg 1$), третьего ($\psi = 1$) и второго ($\psi \ll 1$) порядка.

2.4 Ограничения, налагаемые соотношениями эквидистантности

Условие (1.9) и требование макроскопичности числа пар ЭС с инверсией населенностей приводят к представлению о S-поверхностях (Р-плоскости - это частный случай S-плоскостей при $\mathbf{n} = \mathbf{e}$, поэтому символ S относится здесь и к Р-плоскостям), позволяющему исключить из рассмотрения все состояния электронов, кроме состояний $R = \{R^s\} = \{ \{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}'\rangle\}^s \}$ с волновыми векторами $\mathbf{k} = \mathbf{s} + \mathbf{q}/2 + \delta(\mathbf{q}/q)$, $\mathbf{k}' = \mathbf{s} - \mathbf{q}/2 + \delta(\mathbf{q}/q)$, которые локализованы вблизи S-поверхностей в слое толщиной $\sim q \sim (10^{-3} \div 10^{-1})\pi/a$, $\delta = \delta(s) = q^{-1}(\mathbf{q}, \frac{1}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') - \mathbf{s})$, $|\delta| \leq q/2$. Однако и в R не все состояния равноценны. Среди них следует выделить состояния с энергиями из интервала 2Δ вблизи энергии Ферми μ , поскольку именно они могут иметь заметную разность в населенностях. Обозначим множество пар ЭС с энергиями, удовлетворяющими условию

$$\mu - \Delta \leq \varepsilon(k), \quad \varepsilon(\mathbf{k}') \sim \varepsilon(\mathbf{s}) \leq \mu + \Delta, \quad (2.25)$$

через $R_{\mu\Delta}$. Множество $R_{\mu\Delta}$ представляет собой объединение множеств $R_{\mu\Delta}^s$, каждое из которых связано со своей поверхностью S и при заданном Δ определяется дисперсией $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{s})$ на поверхностях S. Ясно, что $R_{\mu\Delta}^s = R^s$, если на поверхности S выполняются неравенства

$$\varepsilon_{min} \geq \mu - \Delta, \quad \varepsilon_{max} \leq \mu + \Delta, \quad (2.26)$$

и $R_{\mu\Delta} = R$, если неравенства (2.26) выполняются на каждой из поверхностей S . Например, для спектра (2.16) при $\varepsilon_1 \approx 0,3$ эВ, что соответствует зоне шириной 5 эВ, $\Delta \approx 0,1$ эВ и μ вблизи потолка зоны ($\mu \sim \varepsilon_{max} = \varepsilon_0 + 4\varepsilon_1$) весь приведенный лист 1 поверхности $S_{[001]}$ (см. рис. 2.1) заключен между изоэнергетическими поверхностями $\varepsilon = \mu \pm \Delta$, то есть неравенства (2.26) удовлетворяются. Для сплавов на основе железа, как показано в главе 4, $\Delta \approx 0,24$ эВ - достаточно велико, и, следовательно, ограничение (2.25) не является слишком жестким.

Множество $R_{\mu\Delta}$ содержит все пары ЭС, вклад которых в индуцированные излучательные переходы может оказаться макроскопическим. Поэтому дальнейшая задача, имеющая непосредственное отношение к определению спектра генерируемых фононов, состоит в выделении из $R_{\mu\Delta}$ множеств $R_{\mu\Delta}(\mathbf{q})$, включающих в себя пары эквидистантных состояний, ответственных за излучение фононов с фиксированным по величине и направлению \mathbf{q} . При ее решении в качестве определяющих по-прежнему примем требования макроскопичности $|R_{\mu\Delta}(\mathbf{q})|$ - числа пар в $R_{\mu\Delta}$ и максимальной ИН, а также условия (1.9, 1.10), полагая зонные состояния электронов стационарными. Каждое из множеств $R_{\mu\Delta}^s$, входящих в $R_{\mu\Delta}$, естественно рассматривать по отдельности. Разложим энергии состояний $|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}'\rangle$, локализованных вблизи поверхности S , по степеням отклонений $\mathbf{k} - \mathbf{s}, \mathbf{k}' - \mathbf{s}$, ограничиваясь квадратичными членами. В этом приближении из (1.9, 1.10), с учетом (2.25), получим

$$(\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s})) + \hbar \delta m^{-1}(\mathbf{s}, \vec{\xi}) = q^{-1} \omega_j(\mathbf{q}) = c_j \vec{\xi}, \quad (2.27)$$

где $m^{-1} = \hbar^{-2}(\vec{\xi}, \vec{\nabla})^2 \varepsilon$; $\vec{\xi} = \mathbf{q}/q$, $c_j \vec{\xi}$ - скорость звука. Если вторым слагаемым в (2.27) пренебречь, то равенство (2.27) будет выполняться всюду на поверхности S только при условии

$$(\vec{\xi}, (\vec{\tau}, \vec{\nabla})\mathbf{v})|_s = 0, \quad (2.28)$$

где $\vec{\tau}$ - любой единичный вектор, лежащий в плоскости касательной к S . Согласно (2.28) и определению S -поверхности, вектор $(\vec{\tau}, \vec{\nabla})\mathbf{v}$ ортогонален $\vec{\xi}$ и \mathbf{e} , поэтому при $\vec{\xi}$ неколлинеарном \mathbf{e} равенство (2.28) может выполняться, если на поверхности S вектор

$(\vec{\tau}, \vec{\nabla}) \mathbf{v}$ коллинеарен некоторому постоянному вектору \vec{v}_0 , то есть, если поле скоростей на поверхности S задается выражением

$$\mathbf{v}(\mathbf{s}) = v_0(\mathbf{s})\vec{v}_0 + \tilde{\mathbf{v}}, \quad \vec{v}_0, \tilde{\mathbf{v}} \perp \mathbf{e}, \quad (2.29)$$

где $\tilde{\mathbf{v}}$ - постоянный вектор. Для поля скоростей (2.29) равенство (2.27) без второго слагаемого имеет место при $\vec{\xi}$ ортогональном \vec{v}_0 и $(\vec{\xi}, \tilde{\mathbf{v}}) \approx c_{j\vec{\xi}}$. Учет второго слагаемого в (2.27) становится необходимым, когда $(\vec{\xi}, \mathbf{v})|_S = \text{const} \approx c_{j\vec{\xi}}$. В этом случае равенство (2.27) будет выполняться на поверхности S , если изменение первого слагаемого при смещении в поверхности S может компенсироваться изменением второго. Зависимость второго слагаемого от дополнительного параметра δ позволяет обеспечить такую компенсацию при менее жестких, по сравнению с (2.28), ограничениях на закон дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{s})$ посредством выбора в каждой точке поверхности S подходящего значения δ из интервала $[-\frac{1}{2}q, \frac{1}{2}q]$. Таким образом, параметр δ следует считать функцией от \mathbf{s} , заданной неявно соотношением (2.27). Разрешая (2.27) относительно δ , получим

$$\delta = \hbar^{-1}m(\mathbf{s}, \vec{\xi})[c_{j\vec{\xi}} - (\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s}))]. \quad (2.30)$$

Вклад каждого из слагаемых в (2.27) зависит от взаимной ориентации $\vec{\xi}$ и \mathbf{e} . При $\vec{\xi} \rightarrow \pm \mathbf{e}$ первое слагаемое убывает, и при $\vec{\xi} = \pm \mathbf{e}$ в (2.27) остается только второе слагаемое, которое может оставаться неизменным на поверхности S лишь при $\delta = \hbar^{-1}m(\mathbf{s}, \mathbf{e})c_{j\mathbf{e}}$. Заметим, что на поверхности S могут существовать точки, в окрестности которых $m^{-1} \rightarrow 0$ (точки перегиба функции $\varepsilon(\mathbf{k})$), и второе слагаемое в (2.27) становится малым, поскольку конечные δ не могут скомпенсировать убыль m^{-1} . Поэтому равенство (2.27), полученное из (1.9, 1.10) в квадратичном приближении по $\mathbf{k} - \mathbf{s}$, $\mathbf{k}' - \mathbf{s}$, в окрестности таких точек выполняться не может, и их следует исключить. Поскольку $|\delta| \leq \frac{1}{2}q$, то при заданном q соотношение (2.30) накладывает ограничения на область изменения функций $m(\mathbf{s}, \vec{\xi})$, $\mathbf{v}(\mathbf{s})$. Наоборот, при заданных m , \mathbf{v} соотношение (2.30) определяет в каждой точке поверхности S нижнюю границу для возможных значений q :

$$q \geq q_{\min}(\mathbf{s}, \vec{\xi}) = 2|\delta(\mathbf{s}, \vec{\xi})|. \quad (2.31)$$

В случае Р - плоскостей при $\vec{\xi} \parallel \mathbf{n}$ имеем $(\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s})) = 0$ и из (2.30), (2.31) находим:

$$q_{\min} = 2\hbar^{-1}m(\mathbf{s}, \vec{\xi})c_{j\vec{\xi}}, \quad (2.32)$$

где m совпадает с $m_{\xi\xi}^*$ - компонентой тензора эффективных масс: $m = m_{\xi\xi}^*$.

При $m = (1 \div 5) m_o$ (m_o - масса свободного электрона) и $c_{j\vec{\xi}} \sim 10^3$ м/с получаем $q_{\min} \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$. Если $\vec{\xi}$ отклоняется от \mathbf{n} , то q_{\min} снижается и зависит от величины $(\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s})) \neq 0$. При $|\mathbf{v}(\mathbf{s})| < c_{j\vec{\xi}}$, всегда $q_{\min} > 0$, но при $|\mathbf{v}(\mathbf{s})| > c_{j\vec{\xi}}$, имеется направление \mathbf{q} , для которого $q_{\min} = 0$ (если $|\mathbf{v}(\mathbf{s})|c_{j\vec{\xi}}^{-1} \gg 1$, это направление близко к \mathbf{n} , если же $|\mathbf{v}(\mathbf{s})|c_{j\vec{\xi}}^{-1} \sim 1$, оно сильно отклоняется от \mathbf{n}). Следует иметь в виду, что направление $\mathbf{v}(\mathbf{s})$ не обязательно сохраняется постоянным на Р-плоскости. Тогда снижение q_{\min} за счет отклонения $\vec{\xi}$ от \mathbf{n} достигается ценой уменьшения числа пар инверсно населенных состояний, связанных уже с меньшей, по сравнению со случаем $\vec{\xi} \parallel \mathbf{n}$, областью Р-плоскости. Таким образом, в случае $\vec{\xi}_i$, неколлинеарных \mathbf{n} , Р - плоскость может разбиваться на участки P_i , каждому из которых будет отвечать свое направление $\vec{\xi}$. В свою очередь, кривые Р-поверхности имеет смысл рассматривать лишь в том случае, если их можно разбить на совокупность приближающихся к плоским участков. Так, например, вблизи шестиугольной грани ПЗБ вид Р-поверхности близок к виду S-поверхности, изображенной на рис. 2.2. На грани Р-поверхности принадлежат линии LW, разделяющие грань на области с противоположными знаками нормальной к грани компоненты групповой скорости электронов, то есть выступающие над и под гранью участки Р чередуются. Отметим, что подобный характер поверхности не связан с конкретным видом закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$, а следует из соображений симметрии [105]. Можно допустить, что вблизи шестиугольной грани поверхность Р приближенно разбивается на шесть плоских участков (с центральными линиями LW), проецирующихся на секторы грани ПЗБ, ограниченные линиями LK, LU. Нормали \mathbf{n}_j ($j = 1, \dots, 6$) к этим участкам группируются вблизи одной из осей третьего порядка $\langle 111 \rangle$, а степень отклонения $\vec{\xi}_j$ от

\mathbf{n}_j зависит от величины скорости \mathbf{v}_p электронов на линиях LW.

Рассмотрим теперь S-поверхности. Особенностью этого случая является наличие первого слагаемого в (2.27), даже если S-плоскость и $\vec{\xi} = \pm \mathbf{n}$ (в случае P-плоскостей $(\vec{\xi}, \mathbf{v})|_p = 0$ при $\vec{\xi} = \pm \mathbf{n}$). Индуцированным излучательным переходам из состояний с большей энергией в состояния с меньшей энергией отвечают $\vec{\xi}$, ориентированные в направлении возрастания энергии электронов. Поэтому $\vec{\xi}$ должно быть таким, чтобы произведение $(\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s}))$ в (2.27) было положительным. Согласно (2.31), q_{\min} зависит от $\vec{\xi}$ и изменяется на поверхности S от точки к точке. Обозначим через $q_m(\vec{\xi})$ максимальное при данном $(\vec{\xi})$ значение $q_{\min}(\mathbf{s}, \vec{\xi})$. Среди возможных $\vec{\xi}$ выделенными являются те, которым соответствуют:

1. $(\vec{\xi}, \mathbf{v}(\mathbf{s})) \geq 0$ для большинства точек поверхности S;
2. максимальная знакопостоянная разность населенностей состояний по разные стороны от поверхности S;
3. малые $(\leq 10^{-1}\pi/a)$ значения q_m .

Заметим, что для данной поверхности S может и не существовать единственного $\vec{\xi}$, при котором эти условия выполняются совместно во всех ее точках. Тогда необходимо исследовать возможность разбиения поверхности S на участки $S^{(i)}$ с выделенным для каждого участка направлением $\vec{\xi} = \vec{\xi}_i$. Требование макроскопичности $|R_{\mu\Delta}^{s(i)}(\mathbf{q}^{(i)})|$ для любого из искомым $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(i)}$ предполагает справедливость (2.27) для большинства точек участка $S^{(i)}$ поверхности S и будет удовлетворяться всюду на участке $S^{(i)}$ при

$$q^{(i)} \geq q_m(\vec{\xi}^{(i)}). \quad (2.33)$$

При фиксированном $\vec{\xi}^{(i)}$ неравенство (2.33) определяет минимальный по величине волновой вектор фононов, излучаемых при индуцированных переходах электронов между ЭС из множества $R_{\mu\Delta}^{s(i)}(\mathbf{q}^{(i)})$.

Заметим, что требование выполнения условий эквидистантности (1.9, 1.10) позволяет проводить сравнение поверхностей S, свя-

занных с различными \mathbf{e} , и выделять те из них, которые при заданном \mathbf{q} обладают наибольшей площадью $\Sigma_{s(\mathbf{q})}$ областей $S(\mathbf{q})$ приведенных листов поверхности S . Очевидно, что число пар активных в генерации ЭС, локализованных вблизи $S(\mathbf{q})$, пропорционально $\Sigma_{s(\mathbf{q})}$. Например, для спектра (2.16) при $\mathbf{e} \parallel [001]$ и $\mathbf{e} \parallel [110]$ существуют соответственно плоский (лист 2 на рис. 2.1) и кривой (рис. 2.3) приведенные листы поверхностей S , для которых, с точки зрения максимума инверсии населенностей, выделенным является $\mathbf{q} \parallel [110]$. Сравним эти листы. Нетрудно убедиться, что требования максимальности ИН, положительности $(\vec{\xi}, \mathbf{v})$, сохранения знака разности населенностей удовлетворяются для половины участка $S_{[001]}$, при $\vec{\xi} = \pm(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)/\sqrt{2}$. Однако большинство точек участка ни при каких ε_1 и $q < 0,1\pi/a$ не удовлетворяют (2.27). Это связано с тем, что $(\vec{\xi}, \mathbf{v})$ на $S_{[001]}$ изменяется в широких пределах от 0 до $2\sqrt{2}a\varepsilon_1$, тогда как $m^{-1} = -\hbar^2 a^2 \varepsilon_1$ остается постоянной. Поэтому равенство (2.27) за счет малого (не превышающего $0,1\pi/a$) изменения δ обеспечивается лишь для небольшого числа точек листа 2 поверхности $S_{[001]}$. В результате число пар эквидистантных состояний, связанных с ним, оказывается малым и не возрастает существенно при отклонении $\vec{\xi}$. Напротив, в случае кривой поверхности (2.22), см. рис. 2.3, при том же $\vec{\xi}$ равенство (2.27) может выполняться в области сравнимой с участком $S_{[110]}$ этой поверхности, расположенным внутри ПЗБ. Размеры области зависят от ε_1 и q . Действительно, первое слагаемое в (2.27) на поверхности (2.22) исчезает при $\vec{\xi} = (1/\sqrt{2})(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$, а множитель $m^{-1} = -\hbar^2 a^2 \varepsilon_1 \sin^2 \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2)$ изменяется. Поскольку $m^{-1} \rightarrow 0$ при $(\eta_1 + \eta_2) \rightarrow 0$, из области изменения переменных η_1, η_2 следует исключить область

$$|\eta_1 + \eta_2| \leq 2 \arcsin [2\hbar c_{j\vec{\xi}} (q\varepsilon_1 a^2)^{-1}]^{1/2}, \quad -|\eta_1 + \eta_2| \leq \eta_1 - \eta_2 \leq |\eta_1 + \eta_2|,$$

в которой $|\delta| \geq |\delta|_{\max} = q/2$. В частности, при $c_{j\vec{\xi}} = 5 \cdot 10^3$ м/с, $a = 3,5 \cdot 10^{-10}$ м, $\varepsilon_1 = 10^{-19}$ Дж, получим: $|\eta_1 + \eta_2| \leq \pi/4$ для $q = 0, 2\pi/a$, и $|\eta_1 + \eta_2| \leq \pi/2$ для $q = 0, 02\pi/a$. Оценка показывает, что исключаемая часть поверхности составляет для $S_{[110]}$ около 10 % в первом случае и 30% - во втором. Поскольку площадь листа

$S_{[110]}$ велика ($\Sigma \sim 10\pi^2/a^2$), то и число пар эквидистантных состояний вблизи листа $S_{[110]}$ тоже велико. Итак, сравнение плоских и кривых поверхностей S с учетом условий эквидистантности в случае спектра (2.16) свидетельствует в пользу кривых поверхностей.

2.5 Потенциально активные пары электронных состояний в спектре ГЦК-модификации железа

С точки зрения описания $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения (МП) представляет интерес исследование S - поверхностей в случае железа с ГЦК-решеткой. Проведение детального исследования, однако, оказывается затруднительным, поскольку требует знания спектра $\varepsilon(\mathbf{k})$ и поля скоростей $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ в области, ограниченной изоэнергетическими поверхностями $\varepsilon(\mathbf{k}) = \mu \pm \Delta$, тогда как данные о спектре, имеющиеся в литературе, относятся лишь к линиям симметрии (и преимущественно к ОЦК модификации железа), а данные о поле скоростей и вовсе отсутствуют. Поэтому представляется целесообразным обсудить - в какой мере могут быть использованы результаты, полученные для модельного спектра (2.16). Прежде всего отметим, что все плоскости симметрии обратной решетки ($k_i \pm k_j = 4\pi m/a$) являются S -плоскостями независимо от вида закона дисперсии, причем каждой из них соответствует вектор \mathbf{e} , направленный по нормали к плоскости. Это непосредственно следует из соображений симметрии. Действительно, скорость \mathbf{v} , будучи инвариантом относительно операции отражения в плоскости симметрии, не может иметь отличной от нуля составляющей в направлении нормали к ней и, значит, целиком лежит в плоскости симметрии. Отсюда ясно, что при $\mathbf{e} \parallel [001]$ приведенный лист 1 (см. рис. 2.1) поверхности $S_{[001]}$ остается и для спектра железа. Однако, нет оснований считать, что приведенный лист 2 этой поверхности сохранит свою форму.

В самом деле, уже простейшая модификация спектра (2.16):

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - 2\varepsilon_1 \sum_{ij} (1 - \delta_{ij}) \cos \eta_i \cos \eta_j + 2\varepsilon_2 \sum_i \cos 2\eta_i, \quad (2.34)$$

учитывающая взаимодействие со вторыми соседями [104], приводит к тому, что лист 2 изгибается, увеличивая свою площадь. В зависимости от знака ε_2 выгибание листа 2 будет происходить внутрь зоны Бриллюэна ($\varepsilon_2 > 0$) или к граням зоны ($\varepsilon_2 < 0$), что иллюстрируется на рис. 2.5. Таким образом, плоская форма

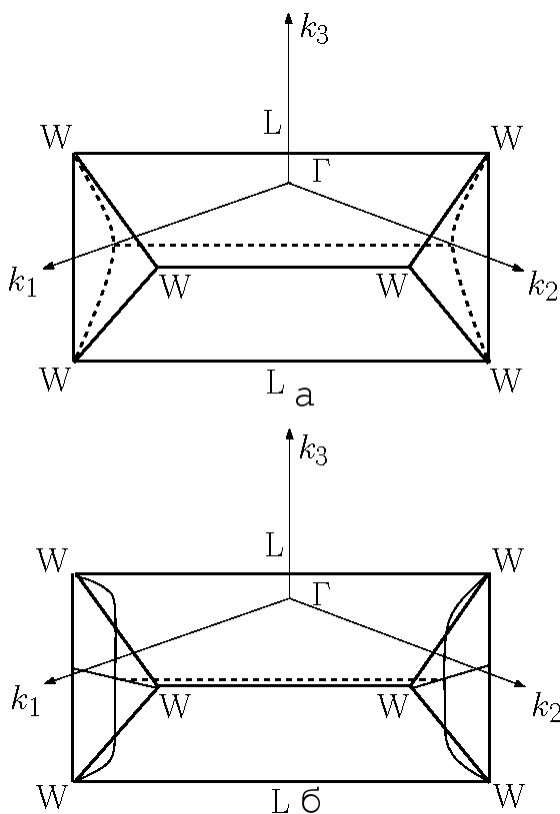


Рис. 2.5. Вид приведенных кривых листов 2 $S_{[001]}$ для закона дисперсии (2.34): а - параметр $\varepsilon_2 > 0$; б - параметр $\varepsilon_2 < 0$. Пересечение поверхности $S_{[001]}$ с плоскостью $k_3 = 0$ показано горизонтальными штриховыми линиями

листа 2 есть следствие конкретных особенностей закона дисперсии. Можно утверждать также, что лист 2 в случае спектра железа будет пересекаться с шестиугольными гранями ПЗБ по тем же горизонтальным линиям WLW, как и лист 2 на рис. 2.1, 2.5. Действительно, из соображений симметрии следует, что на линиях WL (а также и WX) скорость \mathbf{v} направлена вдоль линий, то есть $\mathbf{v} \parallel \mathbf{e} \parallel [001]$, и, значит, горизонтальные линии WLW принадлежат листу 2 поверхности $S_{[001]}$. Пересечение листа 2 с квадратными гранями ПЗБ $k_1 = 2\pi/a$, $k_2 = 2\pi/a$ в случае спектра железа может происходить вдоль линии WYW, как и для спектра (2.16), лишь при отсутствии дисперсии ϵ на линиях WX, то есть при обращении в ноль на этих линиях вектора скорости \mathbf{v} . В противном случае пересечение будет происходить либо вдоль кривой линии Λ , определяемой требованием $(\mathbf{v}, \mathbf{e})|_{\Lambda} = 0$, как на рис. 2.5 а, либо в отдельных точках W, как на рис. 2.5 б. Подчеркнем, что с точки зрения реализации мазерного эффекта кривые листы 2 имеют существенное преимущество перед плоскими. В самом деле, пары ЭС вблизи плоских листов 2 не могут давать вклад в генерацию фононов с $\mathbf{q} \parallel [001]$, так как не обладают ИН в этом направлении, а для $\mathbf{q} \parallel [110]$ этот вклад, как отмечалось выше, мал, то есть при $\mathbf{q} \parallel [001]$ и плоских листах 2 активны в генерации лишь пары ЭС вблизи листа 1. В случае кривых листов 2 нет запрета на генерацию фононов с $\mathbf{q} \parallel [001]$. Поэтому для спектра железа следует ожидать заметного увеличения числа пар ЭС, активных в генерации фононов с $\mathbf{q} \parallel [001]$, по сравнению со спектром 2.16. Простое сравнение площадей приведенных листов 1 и 2 показывает, что число таких пар может возрасти на порядок.

При $\mathbf{e} \parallel [111]$ вид приведенного листа поверхности $S_{[111]}$, изображенного на рис. 2.2, не должен существенно отличаться от приведенного листа поверхности $S_{[111]}$ в случае спектра железа. Так, линии WLW на шестиугольной грани ПЗБ и линии UXU на четырехугольных гранях ПЗБ будут принадлежать поверхности $S_{[111]}$ и в случае железа, поскольку скорость на них ортогональна $[111]$, что непосредственно следует из симметрии. В отношении вопроса о принадлежности линий WYW поверхности $S_{[111]}$, остаются в си-

ле замечания, сделанные выше при обсуждении линий пересечения листа 2 поверхности $S_{[001]}$ гранью ПЗБ.

При $\mathbf{e} \parallel [110]$ общими элементами приведенных листов поверхности $S_{[110]}$ для спектра (2.16) и спектра железа будут вертикальные линии WXW на квадратных гранях ПЗБ $\mathbf{k}_1 = 2\pi/a$, $\mathbf{k}_2 = 2\pi/a$, и горизонтальные линии WLW на шестиугольных гранях ПЗБ, поскольку на этих линиях скорость \mathbf{v} ортогональна $[110]$. В уточнении нуждаются линии пересечения поверхности $S_{[110]}$ с горизонтальными квадратными гранями ПЗБ (как и в предыдущих случаях) и положение линий WAW (см. рис. 2.3).

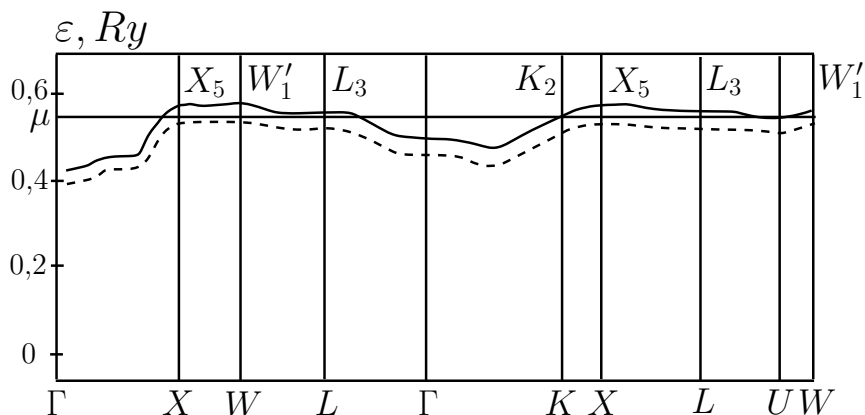


Рис. 2.6. Фрагмент расчетов $[110]$ дисперсионных кривых для ферромагнитного никеля с ГЦК решеткой: сплошная линия - состояния со спином вниз, штриховая - состояния со спином вверх, μ - энергия Ферми

Обсудим теперь вопрос о существовании в спектре энергий ГЦК - фазы железа электронных зон, обладающих слабой дисперсией на приведенных листах поверхностей S и находящихся в приемлемом энергетическом интервале $\Delta \sim 0,2$ эВ вблизи энергии Ферми μ , в соответствии с неравенствами (2.25). Поскольку в интервале от 0 до 1183 К существует ОЦК - модификация железа, большинство расчетов зонной структуры относится именно к этой модификации. Тем не менее, данные работ [106–110] о зонном спектре ГЦК - модификаций железа [106, 107] и никеля [108–110] позволяют ответить на первую часть поставленного вопроса. Подобие

зонных спектров железа и никеля, очевидное из сравнения результатов [107] для подзон со спином вверх с результатами [108–110], дает возможность при выявлении зон со слабой дисперсией использовать наиболее подробные расчеты [110] для Ni. На рис. 2.6 представлены данные [110] для ветвей энергетического спектра с самой слабой дисперсией на линиях, принадлежащих S - поверхностям, обсуждавшимся выше. Видно, что вдоль линий LW, LU, LX энергия близка к значению ε_{L_3} , а на линии XW к значению ε_{X_5} . Согласно [106], разность энергий $\varepsilon_{X_5} - \varepsilon_{L_3} \approx 0,02 Ry \approx 0,27$ эВ (в [106] приведены кривые $\varepsilon(\mathbf{k})$ лишь вдоль ГХ, ГЛ, ГК для γ -фазы железа и даны численные значения энергий зон в точках Г, X, K, L).

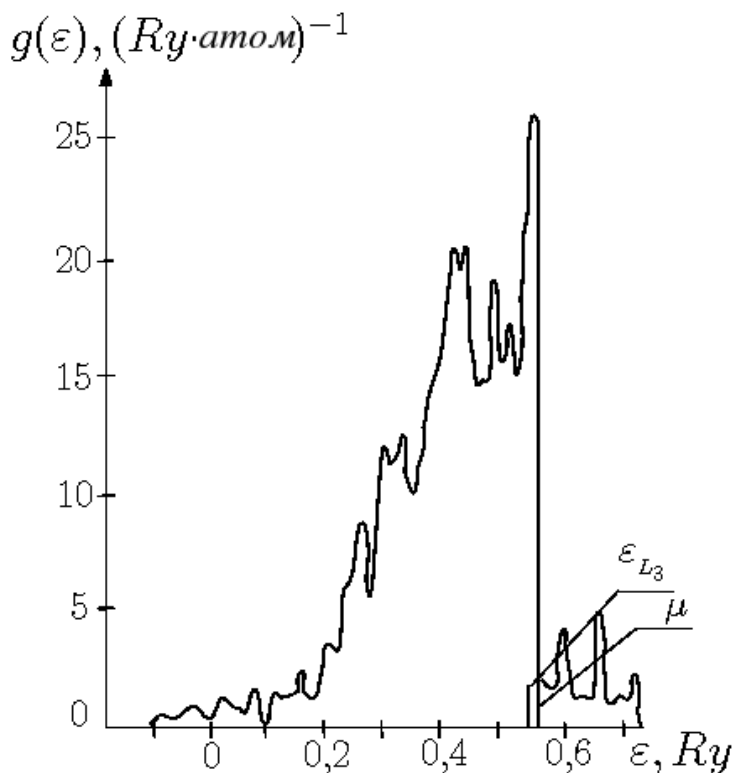


Рис. 2.7. Плотность состояний для немагнитного состояния никеля с ГЦК решеткой [110]. Отмечены положения энергии Ферми μ и энергии ε_{L_3}

Таким образом, на основании данных о зонном спектре представляется весьма вероятным, что S-поверхности со слабой дисперсией энергии на них существуют.

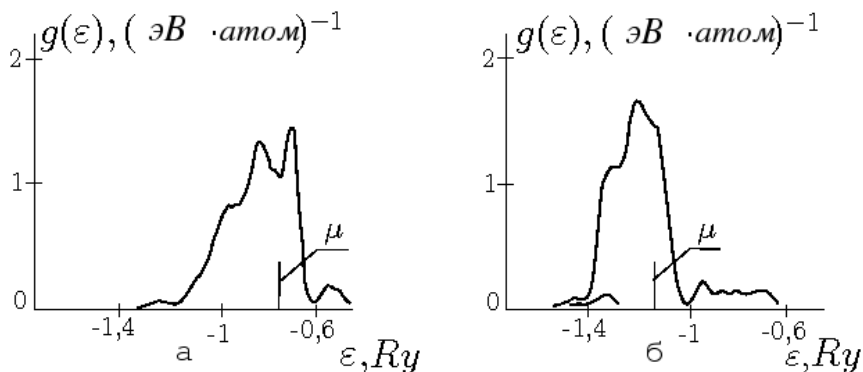


Рис. 2.8. Кривые плотности состояний для железа с ГЦК решеткой [111] при различных электронных конфигурациях атомов: *a* – $3d^7 4s^1$; *b* – $3d^6 4s^2$

Относительно же второй части вопроса - о взаимном расположении уровня энергии μ и энергий на S-поверхностях, то есть о величине интервала $\Delta = |\mu - \varepsilon(\mathbf{s})|$, дать однозначный ответ (с необходимой точностью $\leq 0,1$ эВ) на основе имеющихся расчетов зонного спектра затруднительно. Действительно, выбирая в качестве реперной (средней) энергии на S-поверхности ε_{L_3} , из расчетов [108–110] видим, что ε_{L_3} попадает в область пика плотности состояний $g(\varepsilon)$ с наибольшей энергией (вблизи потолка d-зоны), как показано на рис. 2.7. Тогда при известной электронной конфигурации, находя положение μ , в качестве Δ можно брать $\varepsilon_{L_3} - \mu$. Однако, точная электронная конфигурация атомов железа, находящегося в твердом (металлическом) состоянии, неизвестна, а величина $\varepsilon_{L_3} - \mu$ достаточно сильно изменяется при изменении распределения электронов между 3d -, 4s - состояниями. На рис. 2.8, взятом из [111], проводится сравнение вида кривых $g(\varepsilon)$ для конфигураций $3d^7 4s^1$, $3d^6 4s^2$. Изменение конфигураций сопровождается уменьшением разности энергий пика $g(\varepsilon)$ вблизи потолка d-зоны ($\varepsilon \approx \varepsilon_{L_3}$) и μ от значений 0,6 эВ до 0,2 эВ, в последнем случае пик

практически вырождается в уступ. Промежуточная конфигурация для γ - и α - фаз железа $3d^{6,5}4(sp)^{1,5}$ использовалась в [112] (в [112] не приведен вид $g(\varepsilon)$).

Уместно отметить, что и для ГЦК - модификации Ni результаты расчетов конфигураций ($3d^{9,4}4s^{0,6}$ в [108, 109] и $3d^{8,6}4(sp)^{1,4}$ в [110]) заметно различаются. Если отдавать предпочтение самосогласованным расчетам [110, 112], то конфигурации $3d^{6,5}4(sp)^{1,5}$ для Fe и $3d^{8,6}4(sp)^{1,4}$ для Ni согласуются с утверждением об увеличении вероятности заполнения состояний частью s-электронов при переходе от элементов в середине 3d - ряда к его концу [113], а в качестве ожидаемого значения $\varepsilon_{L_3} - \mu$ можно принять $\Delta \approx 0,4$ эВ, промежуточное по отношению к значениям $\varepsilon_{L_3} - \mu$ для конфигураций $3d^7 4(sp)^1$, $3d^6 4(sp)^2$.

Упомянем еще одну трудность, связанную с неопределенностью трактовки парамагнетизма γ - фазы железа. В экспериментах [114, 115] показано, что по сравнению с α , δ - фазами магнитная восприимчивость γ - фазы в $1,5 \div 2$ раза меньше и не удовлетворяет закону Кюри-Вейса [62]. В [62] эти факты удовлетворительно объясняются паулиевским характером (с обменным усилением) парамагнетизма γ - фазы. Напротив, эксперименты [116, 117] по диффузному магнитному рассеянию нейтронов свидетельствуют о заметной (порядка магнетона Бора μ_B) величине магнитного момента в γ - фазе. Как отмечается в [62], непротиворечивая трактовка этих фактов возможна в теории спиновых флуктуаций, поскольку спиновый момент на узле, равный нулю в среднем из-за флуктуаций своей величины, не регистрируется в статических условиях (магнитная восприимчивость), но может обнаруживаться в экспериментах, характеризующихся временем, сравнимым с временем жизни флуктуации (рассеяние нейтронов).

Существование разупорядоченных локальных магнитных моментов конечной величины в парамагнитном состоянии означает, что локальная плотность состояний меняется от точки к точке, причем спин-поляризованные состояния со спином вверх и вниз равновероятны. В этом случае на S-поверхностях с одним и тем же $\Delta = |\varepsilon(\mathbf{s}) - \mu|$ есть состояния со спинами вверх и вниз. Как показа-

но в [118], усредненная картина плотности состояний по сравнению со случаем ферромагнитного (либо немагнитного) состояния будет уширенной со смещенными и размытыми пиками плотности состояний.

Напомним также, что еще в [119, 120] была предложена гипотеза о двух состояниях атомов железа, находящегося в γ - фазе, γ_1 - состояние с меньшим атомным объемом V_1 и малым магнитным моментом и γ_2 - состояние с большим объемом $V_2 > V_1$ и большим магнитным моментом. В работах [107, 112, 121, 122] (см. также обсуждение в [123]) эта гипотеза получила некоторое подкрепление в рамках простой стонеровской модели. Было показано, что при на-

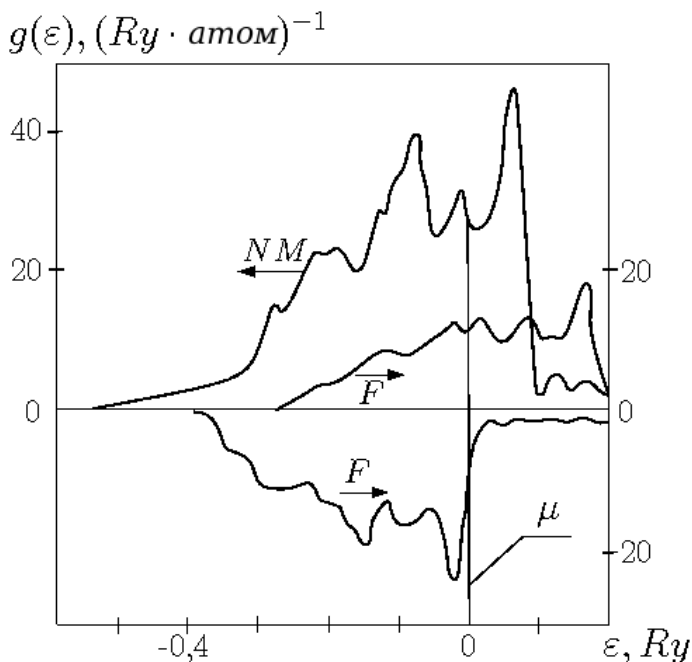


Рис. 2.9. Кривые плотности состояний для железа с ГЦК решеткой: NM - немагнитное состояние, F - ферромагнитное состояние (нижняя кривая для спинов вверх, верхняя - для спинов вниз) [122]

личии обменного расщепления зон на подзоны со спинами вверх \uparrow и вниз \downarrow и непрерывном увеличении параметра решетки при неко-

тором $a = a_0$ ($a_0 \approx 3,58 \text{ \AA}$ в [122] и $3,63 \text{ \AA} < a_0 < 3,71 \text{ \AA}$ в [107]) возникает стабильное ферромагнитное состояние с магнитным моментом $(2,3 \div 3) \mu_B$ на атом, отделенное от состояния с нулевым значением момента энергией равной $0,1 \text{ эВ}$ [112] (в [120] - $0,037 \text{ эВ}$). На рис. 2.9, взятом из [122], приведены функции $g(\varepsilon)$ немагнитного и спин-поляризованного состояний при $a \approx a_0$. Из рисунка видно, что пик почти заполненной подзоны со спином вверх лежит под уровнем Ферми вблизи μ , $\mu - \varepsilon_{L_3 \uparrow} \approx 0,2 \text{ эВ}$. Судя по положению μ , между двумя большими пиками $g(\varepsilon)$ немагнитного состояния, конфигурация атома железа выбрана близкой $3d^7 4s^1$ (сравнение с рис. 2.8 а это подтверждает), однако наличие обменного расщепления делает возможным значения параметра $\Delta \sim 0,2 \text{ эВ}$ и для такой конфигурации. Заметим, что найденное в [122] значение $\varepsilon_L - \mu \approx 0,78 \text{ эВ}$ для немагнитного состояния γ - фазы железа больше соответствующего значения $0,6 \text{ эВ}$ в [111].

Поскольку для чистого (или с малым содержанием никеля и углерода) железа температура $M_S \sim 10^3 \text{ К}$, атомы железа при $T \sim M_S$ с одинаковой вероятностью могут находиться в состояниях γ_1, γ_2 . Если сопоставить состоянию γ_1 конфигурацию $(3d \uparrow)^3 (3d \downarrow)^3 (4sp)^2$, не имеющую локального магнитного момента, а состоянию γ_2 конфигурацию $(3d \uparrow)^5 (3d \downarrow)^2 (4sp)^1$ с атомным магнитным моментом $3\mu_B$, как это предполагается в модифицированной схеме Вейсса [124], то на S-поверхностях равноправными (со значениями $\Delta \sim 0,2 \text{ эВ}$) оказываются состояния над и под уровнем Ферми, связанные, соответственно, с γ_1, γ_2 - состояниями атомов железа.

На основе зонных расчетов трудно также однозначно указать величину и знак разности $\mu_\alpha - \mu_\gamma$ химических потенциалов электронов α - и γ - фаз, которые являются важными характеристиками неравновесного состояния электронной системы. Действительно, согласно [111], для конфигурации $3d^7 4s^1$ химические потенциалы немагнитных фаз практически неразличимы, а для конфигурации $3d^6 4s^2$ $\mu_\alpha - \mu_\gamma \approx -0,2 \text{ эВ}$. Однако расчеты [125], выполненные кластерным методом (для конфигурации $3d^6 4s^2$), дают $\mu_\alpha - \mu_\gamma \approx +0,2 \text{ эВ}$, то есть противоположное по знаку значение.

Правда, ограничение тремя сферами ближайших соседей в [125] при оценке малых разностей $\mu_\alpha - \mu_\gamma$, по-видимому, недостаточно, и предпочтение следует отдать расчету в [111], выполненному методом присоединенных плоских волн.

Имеется еще одно неучтенное обстоятельство: при $\gamma - \alpha$ МП (за исключением сплавов Fe - Ni с содержанием Ni $> 30\%$) переход происходит из парамагнитной γ - фазы в ферромагнитную α - фазу (напомним, что температура Кюри для α железа $T_C = 1041$ К выше точки M_S начала мартенситного превращения). Значит, сравниваться между собой должны μ_γ для парамагнитного и μ_α для ферромагнитного железа. В процессе ферромагнитного упорядочения, как показывают оценки [118] для модельной плотности состояний, μ_α понижается, что является аргументом в пользу отрицательного знака разности $\mu_\alpha - \mu_\gamma < 0$. Разумеется, этот вопрос наиболее просто может быть решен экспериментальным путем, так как наличие большого температурного гистерезиса между прямым и обратным мартенситными превращениями в сплавах Fe - Ni (см. п. 1.2) допускает измерение контактной разности потенциалов (при одной и той же температуре) между образцом, претерпевшим фактически полное $\gamma - \alpha$ превращение (сплавы, содержащие до 28% Ni), и аустенитом того же состава. Ниже при оценках будет использоваться значение $\mu_\alpha - \mu_\gamma = -0,16$ эВ, полученное в п. 1.5 при учете объемного эффекта превращения. Обсуждение этого вопроса будет продолжено в п. 4.5.3.

Сделаем еще ряд замечаний

1. Кроме состояний зон с наименьшей дисперсией (см. рис. 2.6) активными в генерации могут быть и состояния, принадлежащие другим зонам. Так например, в окрестности точки X это состояния зоны, нумеруемой точкой X_2 с энергией $\varepsilon_{X_2} \approx \varepsilon_{L_3}$.
2. Для кривого листа 2 поверхности $S_{[001]}$ с точки зрения выполнения энергетического критерия (2.25) более выгодным является выгибание к граням зоны Бриллюэна (как на рис. 2.5 б), поскольку дисперсия вдоль линии ГК значительна, и выгибание к центру зоны Бриллюэна (как на рис. 2.5 а) приводило

бы к нарушению условий (2.25) для большей части листа 2, сужая область, прилегающую к линиям LWL.

3. Слабая (сравнимая с дисперсией фононных ветвей) дисперсия $\varepsilon(\mathbf{k})$ на значительных участках линий LW, LV в случае Р - поверхностей вблизи шестиугольных граней зоны Бриллюэна (как и для подобных им по форме поверхностей $S_{[111]}$) обуславливает возможность участия пар электронных состояний, разделенных этими поверхностями, в генерации длинноволновых фононов с квазиимпульсами $\hbar\mathbf{q}$, существенно отклоняющимися от оси симметрии третьего порядка $[111]$ к осям второго порядка $[1\bar{1}0]$, $[10\bar{1}]$, $[0\bar{1}1]$ (см. обсуждение после формулы (2.31) в п. 2.4). Напомним, что по определению (2.8) на Р - поверхности обращается в нуль нормальная к поверхности компонента групповой скорости электронов. Это означает, что неравновесные добавки к населенностям состояний по разные стороны от Р прямо пропорциональны проекции \mathbf{e} на направление нормали \mathbf{n} к Р (\mathbf{e} - направление пространственной неоднородности). В отличие от S - поверхностей, меняющихся вместе с изменением направления \mathbf{e} , Р - поверхности от \mathbf{e} не зависят, от \mathbf{e} зависит лишь величина инверсии населенностей. Поэтому выводы, полученные при анализе электронных состояний только вблизи S - поверхностей, нуждаются в коррекции при учете пар состояний, локализованных вблизи плоских (или почти плоских) участков Р - поверхностей. Так например, вместо генерации фононов с квазиимпульсами $\mathbf{q} \parallel \langle 110 \rangle$ строго вдоль осей второго порядка, что было бы естественно из-за обширности поверхностей $S_{\langle 110 \rangle}$ (см. рис. 2.3), можно ожидать отклонения \mathbf{q} от $\langle 110 \rangle$. Действительно, поскольку площадь приведенных S - листов Σ при изменении \mathbf{e} меняется плавно, отклонение \mathbf{e} от оси $[110]$ на небольшой угол, скажем, в 10^0 ($\mathbf{e} \parallel [11\eta]$, $\eta \approx 0,3$), не может сильно уменьшить площадь приведенного листа $S_{[11\eta]}$, по сравнению с $S_{[110]}$, но при этом дополнительный вклад в генерацию фононов с $\mathbf{q} \parallel [11\eta]$ будет давать приблизительно шестая часть пар

состояний, локализованных вблизи Р - поверхностей в окрестности шестиугольных граней зоны Бриллюэна с направлениями нормалей $[\bar{1} 1 1]$, $[1 \bar{1} 1]$ (соответствующая площадь Р - поверхностей $\sim 2\sqrt{3}(\pi/a)^2$), что с избытком компенсирует потери. Значит, учет состояний вблизи Р-поверхностей может обеспечить более низкий порог генерации для волн с векторами \mathbf{q} , лежащими на конусе направлений вблизи $[1 1 0]$, по сравнению с порогом для $\mathbf{q} \parallel [1 1 0]$. Отклонение \mathbf{q} от $[1 1 0]$ существенно для трактовки особенностей морфологии продукта $\gamma - \alpha$ превращения (см. главу 5) и обоснования выбора конкретного пути мартенситной реакции.

4. Вывод о существовании S - поверхностей со слабой дисперсией энергии на них вблизи значений $\varepsilon = \varepsilon_{L_3}$, означает, что форма изоэнергетической поверхности $\varepsilon = const \approx \varepsilon_{L_3}$, должна в общих чертах согласовываться с формой S-поверхностей. Поскольку в случае ферромагнитного Ni в [108–110] для незаполненной подзоны меньшинства (спин вниз - против направления намагниченности) положение уровня Ферми близко к энергии $\varepsilon_{L_3\downarrow}$ ($\varepsilon_{L_3} - \mu \approx 0,3$ эВ), можно использовать расчеты поверхности Ферми. На рис. 2.10 приведены разрезы [109] (см. также [126]) и общий вид [127] соответствующего d - подобной зоне листа поверхности Ферми (5β по обозначениям [109]). Видно, что поверхность сильно выгнута в направлении ребра WKW зоны Бриллюэна, и, значит, для аналогично выгнутого листа 2 поверхности $S_{[001]}$, условие (2.25) будет выполняться. От листа 1 для $S_{[001]}$ фермиевский лист отстоит в \mathbf{k} - пространстве дальше, чем от листа 2, и имеет в области напротив квадратной грани зоны Бриллюэна форму двойного седла. Ясно, что при увеличении энергии изоэнергетическая поверхность еще сильнее приблизится к граням зоны Бриллюэна, что свидетельствует в пользу эффективности пар электронных состояний и вблизи обширных кривых поверхностей $S_{[110]}$, $S_{[1\bar{1}1]}$ (см. рис. 2.2, 2.3)

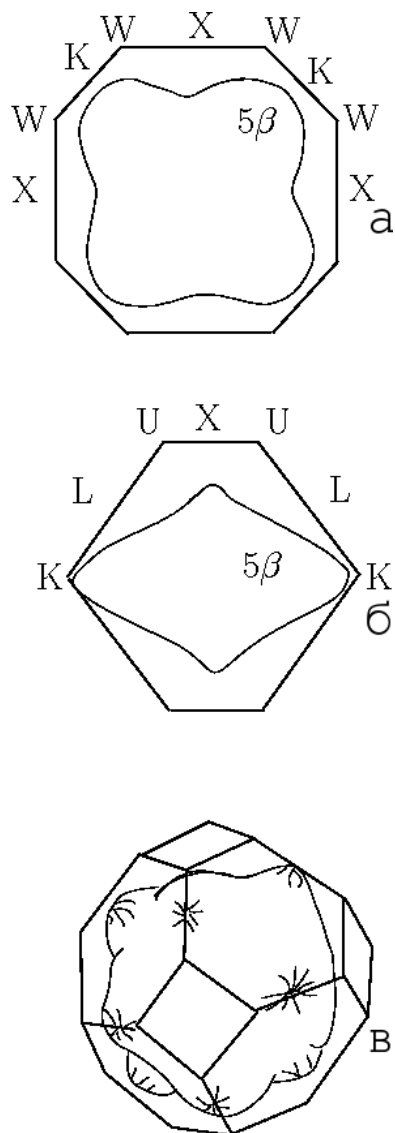


Рис. 2.10. Лист d - подобной зоны (5β со спином вниз) Ni с ГЦК решеткой: а - сечение по плоскости (001); б - сечение по плоскости (011) [126]; в - общий вид [127]

2.6 Заключение к главе 2

Анализ необходимых условий, которым должна удовлетворять излучающая электронная подсистема, приводит к выводу: потенциально активные в генерации ЭС локализованы в \mathbf{k} - пространстве вблизи поверхностей S в областях, ограниченных изоэнергетическими поверхностями $\varepsilon(\mathbf{k}) = \mu \pm \Delta$. Поверхности S разделяют в пространстве волновых векторов состояния электронов с различными знаками проекции групповой скорости $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \vec{\nabla}_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$ на направление пространственной неоднородности \mathbf{e} .

Зависимость $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{s})$ на поверхности S может быть произвольной, однако условие макроскопичности числа инверсно населенных эквидистантных пар ЭС требует медленного изменения энергии электронов на поверхностях S , такого, чтобы для макроскопического большинства точек поверхностей S выполнялись неравенства (2.25). Естественно ожидать, что этому требованию будут отвечать системы с высокой плотностью электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Выделенными являются поверхности S (и соответствующие направления \mathbf{e}) с максимальными по площади участками внутри первой зоны Бриллюэна (приведенными листами), все точки которых при волновом векторе фононов \mathbf{q} , соединяющем пары точек \mathbf{k}, \mathbf{k}' по разные стороны от S , удовлетворяют уравнению (2.27) и требованию неизменности знака разности населенностей состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' .

Величина \mathbf{q} ограничена снизу. Наименьшие значения \mathbf{q} определяются поведением групповых скоростей $\mathbf{v}|_s$ и обратных эффективных масс $m^{-1}|_s$ (зависящих от направления \mathbf{q} - см. (2.27)) на поверхностях S . Для $\mathbf{q} \parallel \mathbf{e}$ минимальное значение $q = q_{\min}$ порядка $(10^{-3} \div 10^{-2} \pi/a)$.

Поскольку подавляющее большинство точек приведенных листов S - поверхностей лежит внутри зоны Бриллюэна, а не на ее границах, элементарные акты излучения фононов с волновыми векторами $q \geq q_{\min}$, обусловленные $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ электронными переходами, локализованными вблизи S - поверхностей, являются нормальными процессами. Значит, в неравновесных условиях, сопровождаю-

щих $\gamma - \alpha$ мартенситное превращение, главным образом, генерируются или усиливаются продольные (квазипродольные) волны, так как для чисто поперечных волн при нормальных процессах обращается в нуль скалярное произведение $(\mathbf{e}_q, \mathbf{q})$, а с ним и матричный элемент (2.4) электрон-фононного взаимодействия.

С точки зрения максимума инверсии населенностей наиболее вероятно генерация фононов с \mathbf{q} , коллинеарными \mathbf{e} . С помощью соотношений (2.5), (2.6) для неравновесных добавок к функции распределения электронов и закона сохранения квазиимпульса (1.10) легко конкретизировать направление \mathbf{q} относительно \mathbf{e} в зависимости от знаков $m^{-1}|_s$, $(\varepsilon - \mu)|_s$ на поверхности S для двух источников неравновесности. В табл. 2.1 указана взаимная ориентация \mathbf{q} и единичных векторов: $\mathbf{e} \parallel \mathbf{e}_T \parallel \vec{\nabla}T$, $\mathbf{e} \parallel \mathbf{e}_\mu \parallel \vec{\nabla}\mu$. Положительным $m^{-1}|_s \rightarrow (+)$ отвечают точки минимумов, а отрицательным $m^{-1}|_s \rightarrow (-)$ - максимумов функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ на поверхности S .

Например, при $m^{-1}|_s < 0 \rightarrow (-)$, $(\varepsilon - \mu)|_s > 0 \rightarrow (+)$, $\mathbf{e} \parallel \mathbf{e}_\mu$ из табл. 2.1 имеем $\mathbf{q} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_\mu$. Последнее означает, что в случае $\mu_\alpha < \mu_\gamma$ генерируются (усиливаются) продольные волны, распространяющиеся от растущего кристалла мартенсита. Из таблицы также следует, что взаимная ориентация \mathbf{q} и \mathbf{e} при $\mathbf{e} = \mathbf{e}_\mu$ не зависит от знака $(\varepsilon - \mu)|_s$, тогда как для $\mathbf{e} = \mathbf{e}_T$ такая зависимость есть.

Это связано с тем, что при $\nabla\mu \neq 0$ имеется один электронный поток из области с большим μ в область с меньшим μ (сопровождающийся переносом заряда), в то время как при $\nabla T \neq 0$ существуют два встречных потока электронов, и перенос заряда практически отсутствует (см. обсуждение к рис. 1.8). Учитывая, что $T_\alpha > T_\gamma$ и

Таблица 2.1. Ориентация волновых векторов генерируемых фононов относительно направления пространственной неоднородности

$(\varepsilon - \mu) _s$	$m^{-1} _s$	
	+	-
+	$\mathbf{q} \downarrow \uparrow \mathbf{e}_T$	$\mathbf{q} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_T$
	$\mathbf{q} \downarrow \uparrow \mathbf{e}_\mu$	$\mathbf{q} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_\mu$
-	$\mathbf{q} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_T$	$\mathbf{q} \downarrow \uparrow \mathbf{e}_T$
	$\mathbf{q} \downarrow \uparrow \mathbf{e}_\mu$	$\mathbf{q} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_\mu$

принимая $\mu_\alpha < \mu_\gamma$ (см. конец п. 2.5), имеем антипараллельность векторов \mathbf{e}_μ и \mathbf{e}_T . Тогда для состояний с $(\varepsilon - \mu)|_s > 0$ действие источников неравновесности частично компенсируется (неравновесные добавки (2.5) и (2.6) вычитаются), а для $(\varepsilon - \mu)|_s < 0$ взаимно усиливается (добавки (2.5), (2.6) суммируются). Разумеется, для принятого в п. 2.5 значения $\mu_\alpha - \mu_\gamma = -0,16$ эВ, превышающего по величине (при пересчете в температурную шкалу) на порядок $T_\alpha - T_\gamma$, и $m^{-1}|_s < 0$ основную роль при усилении (генерации) продольных волн, распространяющихся от растущей α -фазы, должна играть неоднородность химического потенциала, а не температуры. На основе анализа расчетов зонного спектра в п. 2.5 представляется вероятным, что для железа с ГЦК - решеткой значение параметра Δ составляет несколько десятых эВ, и пары электронных состояний в окрестности поверхностей $S_{[001]}$, $S_{[110]}$, $S_{[111]}$ могут быть активными в генерации продольных фононов с направлениями \mathbf{q} вблизи осей симметрии.

Основные результаты, относящиеся к анализу особенностей электронного спектра, необходимых для реализации фононного мазера, опубликованы в работах [55, 88, 89, 128–130].

Глава 3

Уравнения для системы взаимодействующих электронов и фононов. Пороговые условия генерации волн

Выявление пар электронных состояний, допускающих инверсию населенностей, проведенное в предыдущей главе, является наиболее специфическим этапом при конкретизации механизма генерации фононов. Следующий этап заключается в установлении условий, достаточных для функционирования фононного мазера (см. пункт 4 п. 1.5 постановки задачи), то есть в отыскании порогового значения для инверсной разности населенностей. Благодаря всесторонней разработке теории лазерного эффекта (см., например, [98, 131–133]), эта задача не вызывает принципиальных затруднений и решается стандартным путем. Наиболее просто выглядит полуфеноменологический подход, при котором взаимодействие излучающей подсистемы (в нашем случае неравновесных 3d-электронов) и поля излучения (в нашем случае некоторой продольной фононной моды) учитывается по возможности точно, а процессы создания инверсной населенности (накачка) и диссипации учитываются феноменологически [132].

3.1 Пороговые условия для одномодовой генерации

Следуя [132, 133], рассмотрим кратко простейший вариант вывода выражения для пороговой разности населенностей (1.11) при одномодовой генерации. Поскольку обычно генерация начинается с моды, для которой пороговая разность населенностей минимальна, рассмотрение одномодовой генерации представляется оправданным. Выделяя из гамильтонианов (2.1) - (2.3) гамильтониан H_1 электрон-фононной системы для случая одной фононной моды:

$$H_1 = \hbar\omega_q b_q^+ b_q + \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \sum_k W_q^* b_q a_k^+ a_{k'} + W_q b_q^+ a_{k'}^+ a_k, \quad (3.1)$$

полный гамильтониан задачи разобьем на сумму

$$H = H_1 + H_2,$$

где гамильтониан H_2 описывает воздействие остальных подсистем на выделенную (3.1), которое можно трактовать как воздействие тепловых резервуаров. В (3.1) мы опустили индексы зон у электронных энергий и операторов (случай одной 3d-зоны) и индекс поляризации для энергий и операторов фононов (поляризация считается продольной), \hbar - постоянная Планка.

В представлении Гейзенберга для любого оператора x имеем уравнение движения

$$\frac{\partial x}{\partial t} \equiv \dot{x} = \frac{i}{\hbar} [H, x] = \frac{i}{\hbar} [H_1, x] + \frac{i}{\hbar} [H_2, x] \equiv \dot{x}_1 + \dot{x}_2. \quad (3.2)$$

Используя соотношения коммутации

$$[b_p^+, b_q] = \delta_{q,p}, \quad [b_q^+, b_p^+] = [b_q, b_p] = 0$$

и антикоммутации

$$[a_p^+, a_q]_+ = \delta_{q,p}, \quad [a_p^+, a_q^+]_+ = [a_p, a_q]_+ = 0,$$

из (3.2), (3.1) для операторов фононного поля $b_{\mathbf{q}}^+$, электронной поляризации $d_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ = a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'}$ и разности населенности $\sigma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \equiv \sigma = a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'}$ получаем (\mathbf{k}, \mathbf{k}' удовлетворяют (1.9, 1.10)):

$$\begin{aligned} \dot{b}_{\mathbf{q}}^+ &= (i\omega_{\mathbf{q}} - \varkappa_{\mathbf{q}}) b_{\mathbf{q}}^+ + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{q}}^* d_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+, \\ \dot{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ &= (i\omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \Gamma) d_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ - \frac{i}{\hbar} W_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ \sigma, \\ \dot{\sigma} &= \frac{\sigma_0 - \sigma}{t_{\sigma}} + \frac{2i}{\hbar} W_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} b_{\mathbf{q}}^+ - \frac{2i}{\hbar} W_{\mathbf{q}}^* d_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ b_{\mathbf{q}}, \\ \dot{b}_{\mathbf{q}} &= (\dot{b}_{\mathbf{q}}^+)^+, \quad \hbar\omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

В (3.3) мы пренебрегли флуктуационным воздействием тепловых резервуаров, так как в дальнейшем нас будут интересовать лишь средние значения операторов, а диссипативное воздействие учли феноменологически, введя время релаксации t_{σ} электронных населенностей, затухания фононов $\varkappa_{\mathbf{q}}$ и электронов Γ (считаем, что затуханием Γ обладает пара электронных состояний, переход между которыми приводит к излучению фонона с квазиимпульсом \mathbf{q} , то есть $\Gamma \sim \Gamma_{\mathbf{k}} \sim \Gamma_{\mathbf{k}'}$; σ_0 - начальная инверсная разность населенностей состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' по разные стороны от поверхности S , обусловленная существованием электронных потоков (дрейфовый механизм накачки) и остальными некогерентными процессами в отсутствие мазерного излучения.

По существу, система уравнений (3.3) аналогична уравнениям Блоха в теории магнитного резонанса, что легко усмотреть [134, 135], сопоставляя σ , d^+ , d с проекциями оператора спина S^z , S^+ , S^- , а параметры t_{σ} , Γ^{-1} с временами T_1 , T_2 продольной и поперечной релаксации, соответственно. Отсюда сразу следует известное [134] ограничение:

$$T_1 \geq T_2 : t_{\sigma} \geq \Gamma^{-1}. \quad (3.4)$$

В режиме генерации число квантов генерируемой моды становится макроскопическим, и операторы $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ в хорошем приближении являются C -числовыми функциями времени. Отсюда ясно,

что в режиме генерации усредненные с помощью матрицы плотности системы уравнения (3.3) совпадают с классическими, если все операторы заменить их средними значениями. Ниже такая замена считается выполненной, а обозначения, использованные ранее для операторов, относятся теперь к их средним. Чтобы избавиться от осцилляционной временной зависимости, перейдем к величинам

$$\begin{aligned}\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ &= \exp[-i\Omega_{\mathbf{q}}t] b_{\mathbf{q}}^+, & \tilde{b}_{\mathbf{q}} &= \exp[i\Omega_{\mathbf{q}}t] b_{\mathbf{q}}, \\ \tilde{d}^+ &= \exp[-i\Omega_{\mathbf{q}}t] d^+, & \tilde{d} &= \exp[i\Omega_{\mathbf{q}}t] d,\end{aligned}\quad (3.5)$$

и рассмотрим случай точного резонанса:

$$\hbar\Omega_{\mathbf{q}} = \hbar\omega_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} = \hbar\omega_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (3.6)$$

В стационарном случае из (3.3) при учете (3.5) и (3.6) получаем систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}\varkappa_{\mathbf{q}}\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ - \frac{i}{\hbar}W_{\mathbf{q}}^* \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ &= 0, \\ \Gamma\tilde{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ + \frac{i}{\hbar}W_{\mathbf{q}}\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+\sigma &= 0, \\ \Gamma\tilde{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \frac{i}{\hbar}W_{\mathbf{q}}^*\tilde{b}_{\mathbf{q}}\sigma &= 0, \\ \frac{\sigma_0 - \sigma}{t_{\sigma}} + \frac{2i}{\hbar}W_{\mathbf{q}}\tilde{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ - \frac{2i}{\hbar}W_{\mathbf{q}}^*\tilde{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+\tilde{b}_{\mathbf{q}} &= 0.\end{aligned}\quad (3.7)$$

Стационарное значение σ , отвечающее компенсации усиления и потерь, играет роль пороговой разности населенностей σ . Предполагая существование решения $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \neq 0$, из двух первых уравнений (3.7) находим

$$\sum_{\mathbf{k}'} \sigma_{th} = \frac{\hbar^2 \Gamma \varkappa_{\mathbf{q}}}{|W_{\mathbf{q}}|^2}. \quad (3.8)$$

Заметим, что входящее в (3.8) затухание Γ является некоторым средним значением затухания дипольного момента d для пар состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' , локализованных вблизи S -поверхности. Удобно ввести и среднее по S -поверхности значение $\bar{\sigma}_{th}$ для σ_{th} , проводя (по

теореме о среднем) в (3.8) замену

$$\sum_{\mathbf{k}'} \sigma_{th} = \bar{\sigma}_{th} R_{\mathbf{q}}. \quad (3.9)$$

где $R_{\mathbf{q}}$ - число пар состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' , переходы между которыми приводят к излучению фононов с квазиимпульсом $\hbar \mathbf{q}$. Поскольку пары состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' имеют энергии в некотором интервале Δ (см. (2.25)), замена (3.9) предполагает, что σ_{th} относится к некоторому фиксированному значению энергии $\bar{\varepsilon}$ внутри интервала Δ : $\varepsilon - \mu \in \Delta$; это эквивалентно замене неизоэнергетической S - поверхности изоэнергетической. Учитывая слабую дисперсию $\varepsilon(\mathbf{k})$ на S - поверхностях, подобную замену можно считать естественной. Используя (3.9) и опуская символ усреднения по S - поверхности (горизонтальную черточку над σ_{th}), перепишем (3.8) в виде

$$\sigma_{th} = \frac{\hbar^2 \Gamma \kappa_{\mathbf{q}}}{|W_{\mathbf{q}}|^2 R_{\mathbf{q}}}. \quad (3.10)$$

Из (3.10) следует, что σ_{th} тем меньше, чем больше времена жизни квазичастиц Γ^{-1} , κ^{-1} , электрон-фононное взаимодействие и число пар состояний с инверсной населенностью $R_{\mathbf{q}}$, пропорциональное площади $\Sigma_{S(\mathbf{q})}$ приведенного листа S-поверхности.

Выражая с помощью трех последних уравнений (3.7) \tilde{d}^+ через $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+$ и $\tilde{b}_{\mathbf{q}}$ и подставляя в первое из уравнений (3.7), с учетом (3.10), получим

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \left[\frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} \left(1 + \frac{4t_{\sigma} |W_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar^2 s \Gamma} \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}} \right)^{-1} - 1 \right] = 0. \quad (3.11)$$

Уравнение (3.11) имеет два решения

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ = 0, \quad \sigma_0 < \sigma_{th}, \quad (3.12)$$

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar^2 \Gamma}{|W_{\mathbf{q}}|^2 4t_{\sigma}} \left[\frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} - 1 \right], \quad \sigma_0 > \sigma_{th}, \quad (3.13)$$

показывающих, что амплитуда смещений

$$u_{\mathbf{q}} = \left[\frac{2\hbar^2}{M N \omega_{\mathbf{q}}} \right]^{\frac{1}{2}} \tilde{b}_{\mathbf{q}} \quad (3.14)$$

равна нулю ниже порога генерации и отлична от нуля выше порога генерации. Последнее указывает на классический характер смещений. Действительно, из (3.13) и (2.4) видно, что при $\sigma_0 > \sigma_{th}$ число фононов $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}} \sim |W_{\mathbf{q}}|^{-2} \sim N$ становится макроскопическим и, следовательно, энергия данной моды сравнима с суммой энергий остальных некогерентных фононов.

Чтобы оценить σ_{th} необходимо знать релаксационные параметры $\varkappa_{\mathbf{q}}$, Γ и число пар активных состояний $R_{\mathbf{q}}$. В качестве верхней границы параметров $\varkappa_{\mathbf{q}}$, Γ можно использовать их значения в области высоких температур (T превышает температуру Дебая T_D), когда преобладающим является механизм рассеяния на коротковолновых фононах.

Полагая, что $q \ll \pi/a$, при оценке $\varkappa_{\mathbf{q}}$ используем результаты Вудрафа-Эренрайха (см., например, [136]) для случая $\omega_{\mathbf{q}}\tau \ll 1$, где τ - время свободного пробега тепловых фононов (при $T > T_D$ дебаевских фононов):

$$\varkappa_{\mathbf{q}} = \frac{\lambda_l T \gamma_0^2 \omega_{\mathbf{q}}^2}{\rho c_{\mathbf{q}}^4} \equiv \frac{\pi \lambda_l T \gamma_0^2}{\rho c_{\mathbf{q}}^3 a} \left[\frac{q a \omega_{\mathbf{q}}}{\pi} \right]. \quad (3.15)$$

При записи (3.15) использована формула (4.63) в [136], домноженная, для перевода $\varkappa_{\mathbf{q}}$ в единицы частоты, на скорость звука $c_{\mathbf{q}}$. В (3.15) λ_l - коэффициент теплопроводности решетки, γ_0 - постоянная Грюнайзена, ρ - плотность, a - параметр решетки. Принимая для железа с ГЦК решеткой, $\lambda_l \approx 0,03\lambda_{th}$, $T \sim 10^3$ К, $\lambda_{th} \approx 34$ Вт/(м·К) [137], $\gamma_0 = 2$, $\rho = 7900$ кг/м³, $c_{\mathbf{q}} = 5 \cdot 10^3$ м/с, $a = 3,57 \cdot 10^{-10}$ м из (3.15) получим

$$\varkappa_{\mathbf{q}} \approx 3,5 \cdot 10^{-2} \frac{aq}{\pi} \omega_{\mathbf{q}}, \quad (3.16)$$

то есть для интересующих нас $q \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$ затухание $\varkappa_{\mathbf{q}} \leq (10^{-4} \div 10^{-3})\omega_{\mathbf{q}}$.

Найдем для сравнения затухание $(\varkappa_{\mathbf{q}})_e$, обусловленное взаимодействием с электронами проводимости. При $q \ll \pi/a$ и высоких температурах должно выполняться условие $ql_e \ll 1$, где l_e - длина свободного пробега электронов. Используя формулу Пиппарда (8.2) в [136] при $ql_e \ll 1$, получаем

$$(\kappa_{\mathbf{q}})_e \approx \frac{4n_0 m}{15\rho\tau} (ql_e)^2 = \frac{4n_0 m}{15\rho c_{\mathbf{q}}} (ql_e) \omega_{\mathbf{q}}, \quad (3.17)$$

где n_0 - концентрация свободных электронов, m - масса, $v = l_e \tau^{-1}$ - скорость электрона. Полагая $n_0 = 8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $m \approx 10^{-30} \text{ кг}$, $v \approx 10^6 \text{ м/с}$, ρ , $c_{\mathbf{q}}$ те же, что и в (3.15), из (3.17) имеем

$$(\kappa_{\mathbf{q}})_e \approx 5 \cdot 10^{-4} (ql_e) \omega_{\mathbf{q}}.$$

то есть для $q \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$ сравнимый с (3.16) результат получается при $ql_e \approx 0, 1$, что эквивалентно значениям $l_e = (100 \div 10)a$. При высоких температурах, по-видимому, ближе к реальности значение $l_e \sim 10a$, поэтому дополнительный учет $(\kappa_{\mathbf{q}})_e$ не изменяет оценку (3.16).

Величина Γ затухания дипольного момента обратна τ - времени жизни состояний \mathbf{k}, \mathbf{k}' или времени рассеяния $\tau = \tau_0$ по терминологии [138]. Оценку величины τ_0 можно получить, если известны время релаксации энергии электронов в \mathbf{k}, \mathbf{k}' состояниях $\tilde{\tau}$ и степень неупругости релаксации δ_0 - обратное число актов рассеяния, нужных для релаксации заметной доли энергии

$$\tau_0 \equiv \frac{\tilde{\tau}}{\delta_0^{-1}}. \quad (3.18)$$

Согласно [138] при $T > T_D$

$$\delta_0^{-1} \approx (2N_{\mathbf{p}} + 1) \frac{|\varepsilon - \mu|}{\Delta\varepsilon} \approx \frac{2k_B T |\varepsilon - \mu|}{\hbar^2 \omega_{\mathbf{p}}^2}, \quad (3.19)$$

где $N_{\mathbf{p}} \approx k_B T / \hbar \omega_{\mathbf{p}}$ - числа заполнения для коротковолновых фононов с частотами $\omega_{\mathbf{p}} \approx c\pi/a \approx k_B T_D / \hbar$, $\Delta\varepsilon \approx \hbar \omega_{\mathbf{p}}$ - теряемая (при $\varepsilon - \mu > 0$) или поглощаемая (при $\varepsilon - \mu < 0$) при неупругом взаимодействии энергия. Присутствие в (3.19) множителя $(2N_{\mathbf{p}} + 1)$ нетрудно понять, учитывая, что при больших числах заполнения $N_{\mathbf{p}}$ процессы индуцированного испускания и поглощения фононов доминируют при рассеянии, и „... на $N_{\mathbf{p}} + 1$ актов испускания приходится $N_{\mathbf{p}}$ актов поглощения, то есть в релаксации энергии из $2N_{\mathbf{p}} + 1$ актов эффективен только один“ [138].

В экспериментах [139] быстрый нагрев электронной подсистемы короткими лазерными импульсами позволил оценить для никеля время $\tilde{\tau} \approx 10^{-10}$ с. Это время электрон-решеточной релаксации, так как роль теплового резервуара, обладающего наибольшей теплоемкостью, играют коротковолновые фононы (им соответствует максимум спектральной плотности состояний фононного спектра). Полагая, вслед за [139], что поглощение энергии лазерного импульса осуществляется главным образом 3d-электронами, естественно считать, что масштаб $\tilde{\tau}$ в никеле будут определять электроны с энергиями в окрестности пика плотности состояний вблизи потолка 3d-зоны, так как они дают наибольший парциальный вклад в теплоемкость электронной подсистемы. Напомним, что те же состояния электронов считаются активными в генерации фононов в случае ГЦК-фазы железа (см. п. 2.5). Поэтому оценку $\Gamma \sim \tau_0^{-1}$ можно провести с помощью соотношений (3.18), (3.19), полагая в них, согласно п. 2.5, $|\varepsilon - \mu| \sim (0, 2 \div 0, 3 \text{ эВ})$ или $|\varepsilon - \mu| \sim (5 \div 8) \hbar \omega_p$, $k_B T \approx 2, 5 \hbar \omega_p$ и $\tilde{\tau} = 10^{-10}$ с. Тогда для τ_0 , Γ находим

$$\delta_0^{-1} \approx 30 \div 50,$$

$$\tau_0 \approx (3 \div 2) \cdot 10^{-12} \text{ с}, \quad (3.20)$$

$$\Gamma \approx (3 \div 5) \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}.$$

Следует отметить, что конечная ширина Γ (при $\Gamma > \omega_q$) уровней энергии электронов позволяет без противоречий с законами сохранения энергии и квазиимпульса в качестве максимального числа электронных состояний R_q использовать величину

$$(R_q)_{\max} \approx 2q \Sigma_q \delta^{-1},$$

$$N\delta \approx 4 \cdot (2\pi/a)^3 \sim q_{\max}^3. \quad (3.21)$$

Здесь δ - объем обратного пространства, приходящийся на одно волновое число, множитель 2 учитывает две ориентации спина, Σ_q

- площадь одного из „пачки“участков, параллельных приведенному листу S - поверхности и отстоящих от него не более чем на квазиимпульс $\hbar \mathbf{q}$ генерируемого фонона, что обеспечивает переход электронов из объема $(\Sigma_{\mathbf{q}} \cdot q)$ состояний с квазиимпульсами $\hbar \mathbf{k}$ в такой же объем с квазиимпульсами $\hbar \mathbf{k}'$, расположенными по разные стороны от поверхности S . Полагая, $\Sigma_{\mathbf{q}} \approx 20(\pi/a)^2$, имеем

$$\Sigma_{\mathbf{q}} \delta^{-1} = \frac{5a}{8\pi} q N, \quad R_{\mathbf{q}} = \frac{5a}{4\pi} q N. \quad (3.22)$$

то есть при $q \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$ число пар состояний, активных в генерации, составляет $(10^{-3} \div 10^{-2})$ от полного числа состояний $2N$. Подставляя (3.22), (3.16), (2.4) в (3.10) при $M \approx 10^{-25}$ кг, $G \approx 10^{-19}$ Дж ($G \approx 0,6$ эВ), $\Gamma \sim (10^{11} \div 10^{12})$ с $^{-1}$, получаем $\sigma_{th} \approx 10^{-4} \div 10^{-3}$.

Используя выражения (2.5), (2.6) для неравновесных добавок к функции распределения электронов и закон сохранения энергии (1.9, 1.10), начальную инверсную разность населенностей представим в виде

$$\sigma_0(\nabla T) = f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'} \approx \frac{y_{\mathbf{k}}}{k_B T} \left| \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial y_{\mathbf{k}}} \right| \left[k_B \tau (\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \vec{\nabla} T - \hbar \omega_{\mathbf{q}} \right], \quad (3.23)$$

$$\sigma_0(\nabla \mu) = f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'} \approx \frac{1}{k_B T} \left| \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial y_{\mathbf{k}}} \right| \left[\tau (\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \vec{\nabla} \mu - \hbar \omega_{\mathbf{q}} \right]. \quad (3.24)$$

В табл. 3.1 приведены значения σ_0 (в пренебрежении слагаемым, пропорциональным $\omega_{\mathbf{q}}$) при различных значениях $y_{\mathbf{k}} = (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T$, $T = 10^3$ К, $\nabla T = \Delta T (10 v_{\mathbf{k}} \tau)^{-1}$, $\nabla \mu = \Delta \mu (10 v_{\mathbf{k}} \tau)^{-1}$, $\Delta T = 100$ К, $\Delta \mu = 0,15$ эВ = $1,74 k_B T$.

Из таблицы видно, что условие генерации $\sigma_0 > \sigma_{th}$ выполняется как для $\sigma_0(\nabla T)$ так и для $\sigma_0(\nabla \mu)$, причем в последнем случае с „запасом“ по порядку величины $2 \cdot 10^{-1} > \sigma_0(\nabla \mu) > 10^{-2} > 10 \cdot \sigma_{th}$. Заметим, однако, что для $|\mathbf{q}| \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$ значение проекции $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ на направление неоднородности имеет порядок 10^3 м/с, и при

Таблица 3.1. Зависимость начальной инверсной разности населенностей от параметра y

y	$ \partial f^0 / \partial y $	$\sigma_0(\nabla T) \cdot 10^3$	$\sigma_0(\nabla \mu) \cdot 10^2$	$\sigma_{th} \cdot 10^3$
0	0,5	0	17,4	(0, 1 ÷ 1)
1	0,197	3,94	6,86	
1,54	0,156	4,78	5,43	
2	0,105	4,2	3,65	
3	0,045	2,7	1,57	

$\tau \sim 10^{-12}$ с масштаб в десять длин свободного пробега электронов $10v_k\tau \sim 10^{-8}$ м, принятый за масштаб неоднородности, оказывается на порядок меньше половины длины волны $\lambda/2 \sim 4\pi/q \sim 10^{-7}$ м; в то же время, для описания мартенситного превращения, как деформационного процесса, естественно считать, что на масштабе неоднородности укладывается не менее половины длины волны (см. обсуждение формулы (1.2) в п. 1.3, пункт 7 в п. 1.5 и главу 6). Но тогда при оценке ∇T и $\nabla \mu$ вместо $10 v_k \cdot \tau$ следует взять $10^2 v_k \cdot \tau$ (значения σ_0 в табл. 3.1 уменьшатся на порядок), и при $\sigma_{th} \sim 10^{-3}$ условие $\sigma_0 > \sigma_{th}$ будет выполняться только для $\sigma_0(\nabla \mu)$. Если же $\sigma_{th} \sim 10^{-4}$, $\sigma_0 > \sigma_{th}$ как для $\sigma_0(\nabla T)$, так и для $\sigma_0(\nabla \mu)$. Дальнейшее обсуждение вопроса о величине пространственного масштаба неоднородного распределения T и μ будет проведено (с иных позиций) в п. 3.3.

3.2 Пороговые условия двух- и трехмодовой генерации. Характер фазовых переходов для поля излучения

Рассмотрим теперь вопрос о роли многофононных процессов в генерации (усилении) волн. Практически при описании $\gamma - \alpha$ превращения могут оказаться существенными электронные переходы между состояниями \mathbf{k}, \mathbf{k}' , локализованными вблизи поверхности $S_{\langle 111 \rangle}$ с участием двух и трех продольных фононов, квазиим-

пульсы которых направлены либо вдоль осей симметрии второго и четвертого порядка (при двухфононном процессе), либо вдоль осей четвертого порядка (при трехфононном процессе), поскольку именно продольные волны, бегущие вблизи направлений $\langle 001 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, будут инициировать процесс деформации Бейна (см. рис. 1.1). Представляет интерес найти условия многомодовой генерации и сравнить их с условием генерации одной моды. Подобное сравнение позволит установить критерий, разделяющий случаи, когда многофононные процессы по отношению к одномодовой генерации могли бы выполнять самостоятельную или вспомогательную функции в мартенситном превращении.

Чтобы вскрыть основные черты двухмодовой генерации, опустим вначале однофононные процессы и используем в качестве гамильтониана электрон-фононной системы модельный гамильтониан:

$$H = \hbar\omega_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}^{\dagger}b_{\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{p}}b_{\mathbf{p}}^{\dagger}b_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}} + \\ + W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{p}}^{\dagger}b_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}'} + b_{\mathbf{p}}b_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}. \quad (3.25)$$

Здесь b^{\dagger} , b , a^{\dagger} , a - операторы рождения и уничтожения фононов и электронов; в суммировании по квазиимпульсам $\hbar\mathbf{k}$ электронов будем учитывать лишь состояния, локализованные вблизи поверхности $S_{[111]}$ (см. рис. 2.2). В (3.25) квазиимпульсы $\hbar\mathbf{q}$ и $\hbar\mathbf{p}$ фононов параллельны осям $[001]$ и $[110]$ ($\mathbf{q} \perp \mathbf{p}$) и выполняются законы сохранения:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar(\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{p}}) = 0, \quad \mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{p} = 0, \quad \mathbf{Q}, \quad (3.26)$$

где \mathbf{Q} - вектор обратной решетки, учитываемый в случае процессов переброса. Поскольку, однако, квазиимпульсы $\hbar\mathbf{q}$, $\hbar\mathbf{p}$ считаются малыми по сравнению с $\hbar\pi/a$, процессы переброса существенны лишь для малой доли переходов с квазиимпульсами $\hbar\mathbf{k}$, $\hbar\mathbf{k}'$ в непосредственной близости от линий LW, XW, и достаточно ограничиться нормальными процессами, для которых в правой части закона сохранения квазиимпульса (3.26) стоит нуль.

При квазиимпульсах $\hbar q, \hbar p \ll \hbar \pi / a$ на границе зоны Бриллюэна для матричного элемента электрон-фоонного взаимодействия имеем оценку:

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \equiv -\frac{G q p \hbar}{2 M N \sqrt{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{p}}}} \equiv W_2, \quad (3.27)$$

где M, N, G - те же, что и в (2.4).

Выполним далее ту же, что и в п. 3.1, последовательность операций:

1. пренебрегая флуктуационным воздействием тепловых резервуаров и учитывая их диссипативное действие феноменологическими параметрами $\Gamma, \varkappa, t_\sigma$, записываем уравнения движения Гейзенберга для операторов фоонного поля b^+, b , электронной поляризации $d_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^+ = a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'}$, $d_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}}$ и разности населенностей σ ;
2. усредняя уравнения движения с помощью матрицы плотности системы, переходим к классическим уравнениям для средних значений операторов;
3. рассматриваем случай точного резонанса и по формулам, аналогичным (3.5), переходим к средним значениям операторов $\tilde{d}^+, \tilde{d}, \tilde{b}^+, \tilde{b}$, не имеющих осцилляционной временной зависимости.

Тогда в стационарном случае имеем систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \varkappa_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^+ - \frac{i}{\hbar} W_2 R \tilde{b}_{\mathbf{q}} \tilde{d}^+ &= 0, \\ \varkappa_{\mathbf{q}} \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ - \frac{i}{\hbar} W_2 R \tilde{b}_{\mathbf{p}} \tilde{d}^+ &= 0, \\ \Gamma \tilde{d}^+ + \frac{i}{\hbar} W_2 \sigma \tilde{b}_{\mathbf{p}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ &= 0, \\ \frac{\sigma_0 - \sigma}{t_\sigma} + \frac{2i}{\hbar} W_2 (\tilde{b}_{\mathbf{p}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \tilde{d} - \tilde{b}_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{q}} \tilde{d}^+) &= 0, \end{aligned} \quad (3.28)$$

которую приводим в сокращенной записи, опустив сопряженные уравнения, получаемые заменами $\tilde{b}^+ \leftrightarrow \tilde{b}$, $\tilde{d}^+ \leftrightarrow \tilde{d}$, $i \rightarrow -i$. В (3.28) через R обозначено число пар электронных состояний, переход между которыми приводит к излучению пар фононов.

Из системы (3.28) для σ находим уравнение:

$$\sigma^2 + \sigma_0 \sigma + \frac{1}{4} \sigma_{th2}^2 = 0,$$

откуда

$$\sigma_{1,2} = \frac{\sigma_0}{2} \pm \frac{\sigma_0}{2} \left[1 - \left(\frac{\sigma_{th2}}{\sigma_0} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \sigma_{th2} = \frac{4 \hbar (\Gamma t_\sigma \kappa_q \kappa_p)^{\frac{1}{2}}}{R |W_2|}, \quad (3.29)$$

где σ_{th2} имеет смысл пороговой разности населенностей при двухмодовой генерации. Действительно, для \tilde{b}_p из (3.28) имеем уравнение:

$$\kappa_p \tilde{b}_p \left[1 - \frac{R \sigma_0 W_2^2 \tilde{b}_p^2}{\hbar^2 (\kappa_q \Gamma + 4 W_2^2 \kappa_p t_\sigma \tilde{b}_p^4)} \right] = 0, \quad (3.30)$$

которое при $\sigma_0 < \sigma_{th2}$ имеет единственное действительное решение $\tilde{b}_p = 0$. При $\sigma_0 > \sigma_{th2}$ наряду с решением $\tilde{b}_p = 0$ имеются еще два действительных решения

$$(\tilde{b}_p)_{1,2} = \frac{1}{2} \left[\frac{R}{\kappa_p t_\sigma} (\sigma_0 - \sigma_{1,2}) \right]^{\frac{1}{2}} \neq 0. \quad (3.31)$$

При $\sigma_0 = \sigma_{th2}$ из (3.29) и (3.31) получаем:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \frac{\sigma_0}{2} = \frac{\sigma_{th2}}{2}; \quad (\tilde{b}_p)_1 = (\tilde{b}_p)_2 = \tilde{b}_{pth} = \frac{1}{2} \left[\frac{R \sigma_{th2}}{2 \kappa_p t_\sigma} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.32)$$

Выражения для \tilde{b}_q получаются заменой $p \leftrightarrow q$.

Исследование устойчивости решений и их интерпретацию проведем, рассматривая, согласно Хакену (см. [98, 133, 135]), переход в режим генерации как фазовый переход для поля излучения. Роли параметра порядка и температуры играют \tilde{b} и $-\sigma_0$. Аналог свободной энергии B легко найти, рассматривая уравнение (3.30) как условие экстремума:

$$\frac{dB}{d\tilde{b}} = 0.$$

Тогда, опуская несущественную постоянную, находим:

$$B \equiv B_2(\tilde{b}) = \varphi(\tilde{b}_{\mathbf{p}}) + \varphi(\tilde{b}_{\mathbf{q}}),$$

$$\varphi(\tilde{b}_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \varkappa_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^2 - \frac{R \sigma_0}{16 t_{\sigma}} \ln \left[1 + \frac{4 t_{\sigma} W_2^2 \varkappa_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^4}{\hbar^2 \Gamma \varkappa_{\mathbf{q}}} \right], \quad (3.33)$$

$\varphi(\tilde{b}_{\mathbf{q}})$ получаем из $\varphi(\tilde{b}_{\mathbf{p}})$ заменой $\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{q}$.

Теперь несложно проверить, что при $\sigma_0 < \sigma_{th2}$ функция $B_2(\tilde{b})$ имеет единственный минимум, отвечающий $\tilde{b} = 0$. При $\sigma_0 = \sigma_{th2}$ появляется точка \tilde{b}_{th} перегиба - предвестник дополнительных экстремумов, возникающих при $\sigma_0 > \sigma_{th2}$. Дополнительному минимуму B_2 отвечает значение \tilde{b}_2 (3.31), а максимуму - \tilde{b}_1 , что означает неустойчивость решения \tilde{b}_1 и устойчивость решения \tilde{b}_2 . Отсюда ясно, что возникает картина, типичная для фазовых переходов первого рода (см. рис. 3.1), в которой значение $\sigma_0 = \sigma_{th2}$ определяет границу абсолютной потери устойчивости фазы с ненулевым параметром порядка.

Аналогом температуры фазового перехода первого рода будет такое критическое значение инверсной разности населенностей $\sigma_0 = \sigma_c$, при котором минимальные значения функции B_2 совпадают, то есть

$$B_2(\tilde{b} = 0) = B_2(\tilde{b}_2) = 0. \quad (3.34)$$

Подставляя σ_2 из (3.29) в (3.31), находим \tilde{b}_2 , подстановка которого в (3.33) позволяет записать (3.34) как явное уравнение для отыскания σ_c .

$$1 + (1 - \psi^{-2})^{1/2} - \ln \left[1 + \psi^2 \left[1 + (1 - \psi^{-2})^{1/2} \right]^2 \right] = 0, \quad (3.35)$$

где $\psi = \sigma_c \sigma_{th2}^{-1}$. Численное решение уравнения (3.35) дает:

$$\psi \approx 1,25, \quad \sigma_c \approx 1,25 \sigma_{th2}.$$

При $\sigma_0 > \sigma_c$ имеем $B_2(\tilde{b}_2) < B_2(0)$, что означает большую устойчивость фазы с $\tilde{b} \neq 0$. Продолжая формальный анализ, видим, что

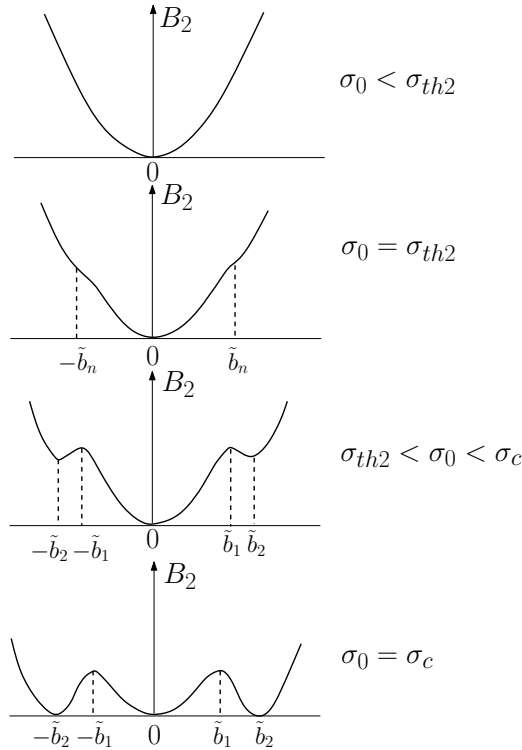


Рис. 3.1. Вид функции $B_2(\tilde{b})$ при различных значениях инверсной разности населенностей σ_0

максимальное значение $B_2(\tilde{b}_1)$, играющее роль высоты потенциального барьера между состояниями с $\tilde{b} = 0$ и $\tilde{b} \neq 0$, как и само значение \tilde{b}_1 , уменьшаются по мере увеличения параметра $\sigma_0 \sigma_c^{-1} > 1$, обращаясь в нуль лишь при $\sigma_0 \sigma_c^{-1} \rightarrow \infty$. Поскольку значения σ_0 заведомо ограничены ($\sigma_0 < 1$), то выполнение равенств $\tilde{b}_1 = 0$ и $B_2(\tilde{b}_1) = 0$, означающих абсолютную потерю устойчивости фазы с нулевым значением параметра порядка, возможно лишь при $\sigma_c = 0$. Но $\sigma_c \sim \sigma_{th} \neq 0$ и нельзя ввести значения σ_c , аналогичного температуре абсолютной потери устойчивости высокотемпературной фазы.

Рассмотрение трехмодовой генерации на частотах $\omega_k, \omega_p, \omega_q$

приводит к аналогичным, в качественном отношении, выводам. Поэтому приведем лишь выражения для пороговой и критической разностей населенностей:

$$\sigma_{th3} = \frac{3}{R} [4 \Gamma t_\sigma^2 \hbar^2 \varkappa_{\mathbf{k}} \varkappa_{\mathbf{q}} \varkappa_{\mathbf{p}} |W_3|^{-2}]^{\frac{1}{3}}, \quad \sigma_c \approx 1,41 \sigma_{th3}, \quad (3.36)$$

где

$$W_3 \equiv W(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{i G k p q \hbar^{3/2}}{(2 M N)^{3/2} (\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{q}})^{1/2}}.$$

Отметим отличие двух- и трехмодовой генерации от одномодовой, которую можно интерпретировать как фазовый переход второго рода для поля излучения, а пороговую разность населенностей σ_{th1} (3.10), выписанную ниже для удобства сравнения еще раз,

$$\sigma_{th1} = \frac{\Gamma \varkappa_{\mathbf{q}} \hbar^2}{R |W_1|^2}, \quad W_1 \equiv W(\mathbf{q}) = \frac{i \hbar^{1/2} G q}{(2 M N \omega_{\mathbf{q}})^{1/2}}, \quad (3.37)$$

как аналог температуры Кюри. Действительно, считая уравнение (3.11) в п. 3.1 условием минимума аналога свободной энергии $B_1(\tilde{b})$, имеем:

$$B_1(\tilde{b}) = \frac{\varkappa \tilde{b}^2}{2} - \frac{\sigma_0 R}{8 t_\sigma} \ln \left[1 + \frac{4 t_\sigma |W_1|^2 \tilde{b}^2}{\hbar^2 \Gamma} \right]. \quad (3.38)$$

Легко проверить, что $B_1(\tilde{b})$ для $\sigma_0 < \sigma_{th1}$ имеет один минимум при $\tilde{b} = 0$, а для $\sigma_0 > \sigma_{th1}$ один минимум при $\tilde{b} \neq 0$. Это указывает на абсолютную неустойчивость упорядоченного состояния ниже, а неупорядоченного выше порога генерации. Типичное поведение для перехода второго рода обнаруживает и параметр порядка, плавно изменяющийся при подходе к точке $\sigma_0 = \sigma_{th1}$.

Существенно отличаются и выражения $\sigma_c \sim \sigma_{th2,3}$ от σ_{th1} . В определения σ_c , наряду с параметрами, задающими σ_{th1} , входит дополнительно время t_σ . Найдем отношения $\sigma_{th2} \sigma_{th1}^{-1}$ и $\sigma_{th3} \sigma_{th1}^{-1}$, полагая, что, как в случае одной, так и двух, либо трех мод, генерируются частоты одного порядка величины. Тогда из формул (3.29), (3.36) и (3.37) с точностью до множителей порядка единицы

получим:

$$\frac{\sigma_{th2}}{\sigma_{th1}} \sim \frac{G}{\hbar} \left(\frac{t_\sigma}{\Gamma} \right)^{1/2} ; \quad \frac{\sigma_{th3}}{\sigma_{th1}} \sim \left[\frac{G}{\hbar} \left(\frac{t_\sigma}{\Gamma} \right)^{1/2} \right]^{4/3}. \quad (3.39)$$

Таким образом, формально при $\hbar^{-1} G t_\sigma^{1/2} \Gamma^{-1/2} < 1$ многомодовая генерация могла бы начаться раньше одномодовой. Следует, однако, иметь в виду, что добиться выполнения этого неравенства за счет уменьшения G или увеличения Γ можно лишь в области пороговых значений $\sigma_{thj} > 1$, $j = 1, 2, 3$, которые, в силу ограничения $\sigma_0 < 1$, недостижимы. Но и параметр t_σ имеет естественный нижний предел значений. Согласно (3.4) $(t_\sigma)_{\min} = \Gamma^{-1}$, но тогда $(\sigma_{th2} \sigma_{th1}^{-1})_{\min} \sim G(\hbar \Gamma)^{-1}$, и для использовавшихся ранее значений $G \sim 10^{-19}$ Дж, $\Gamma \sim 10^{12}$ 1/с получаем $\sigma_{th2} \sigma_{th1}^{-1} \sim 10^3$. Следовательно, роль процессов с участием двух и трех фононов должна сводиться к усилению (и возможно синхронизации) мод, генерируемых в однофононных процессах.

Совместный учет одно- и двухфононных процессов был проведен в наиболее благоприятном для генерации случае, когда переходы электронов с участием одного либо двух фононов происходят между состояниями вблизи различных S-поверхностей. Например, при генерации пары волн вдоль направлений $\Delta - [001]$ и $\Sigma - [110]$ можно рассмотреть однофононные процессы перехода электронов вблизи поверхностей $S_{[001], [110]}$ и двухфононные процессы между состояниями вблизи $S_{[111]}$. Опуская стандартные выкладки и считая параметр $\sigma_0 \sigma_{th2}^{-1} \geq \sigma_{th1} \sigma_{th2}^{-1}$ малым, приведем стационарное решение в наиболее простом случае равенств: чисел генерируемых фононов $\tilde{b}_\Delta^2 = \tilde{b}_\Sigma^2 = \tilde{b}^2$, начальных инверсных разностей населенностей σ_0 чисел пар электронных состояний R и времен продольной релаксации t_σ , относящихся к состояниям вблизи различных S-поверхностей. Решение имеет вид:

$$\tilde{b}^2 = 0, \quad \sigma_0 < \sigma_{th1}, \quad (3.40)$$

$$\tilde{b}^2 \approx \frac{\hbar^2 \Gamma}{4 |W_1|^2 t_\sigma} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th1}} - 1 \right) \left(1 + \left(\frac{2 \sigma_0}{\sigma_{th2}} \right)^2 \right), \quad \sigma_0 > \sigma_{th1},$$

отличающийся от решения (3.13) для чисто одномодовой генерации множителем $1 + (2 \sigma_0 \sigma_{th2}^{-1})^2$, отражающим эффект усиления за счет двухфононных процессов.

3.3 Амплитуды генерируемых волн и деформация, обусловленная волнами

Для протекания мартенситного превращения необходимо, чтобы амплитуда генерируемых волн u превысила определенное пороговое значение $u_{th}(\lambda, T)$, зависящее как от длины волны λ , так и от температуры. Максимальное значение $u_{th}(\lambda)$ можно оценить из геометрических соображений, учитывая, что при чистой деформации Бейна [13] переход к новым положениям равновесия сопровождается относительным смещением соседних в направлении $\langle 001 \rangle$ атомов на $0,1a$ (a - параметр решетки). Значит, неустойчивости следует ожидать при относительных смещениях, больших $0,05a$. Если такие смещения связаны с волной, то, очевидно, ее амплитуда равна $\sim 0,05 \lambda/2 = u_{th}(\lambda)$. Независящее от температуры значение $u_{th}(\lambda)$ естественно сопоставлять с пороговым значением $u_{th}(\lambda, T_0)$, где T_0 - температура равновесия высоко- и низкотемпературной фаз.

По мере переохлаждения системы (для определенности рассматриваем прямое превращение) ниже точки T_0 устойчивость высокотемпературной фазы уменьшается, что должно вести к снижению u_{th} :

$$u_{th}(T, \lambda) < u_{th}(T_0, \lambda),$$

и, как обсуждалось в п. 1.3, вблизи M_S следует ожидать амплитуд $u_{th}(M_S, \lambda)$, обеспечивающих пороговую деформацию $\varepsilon_{th} \sim 10^{-3}$.

При оценке стационарных амплитуд генерируемых волн u влиянием электрон-фононных процессов с участием нескольких фононов можно пренебречь. Тогда, используя связь u и \tilde{b} (3.14) и выражения (3.40), (3.37), имеем:

$$u_{\mathbf{q}} = \left[\frac{2 \hbar}{M N \omega_{\mathbf{q}}} \right]^{\frac{1}{2}} \tilde{b}_{\mathbf{q}} \approx \frac{\hbar}{G q} \left[\frac{\Gamma}{t_{\sigma}} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th1}} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.41)$$

В свою очередь, деформация ε связана с амплитудой соотношением (1.2) п. 1.3:

$$\varepsilon = \frac{2}{\pi} u_{\mathbf{q}} q \approx \frac{2\hbar}{\pi G} \left[\frac{\Gamma}{t_{\sigma}} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th1}} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.42)$$

Полагая $t_{\sigma} = \Gamma^{-1}$, $\sigma_{th1} \sim 10^{-3}$, $(\sigma_0 \sigma_{th1}^{-1} - 1) \approx 1,6$ - этому значению отвечает $\sigma_0(\nabla\mu)$, $y = 2$ в таблице 3.1, при масштабе неоднородности $10^2 v_k \cdot \tau$ (см. конец п. 3.1), $G \sim 10^{-19}$ Дж, $\hbar \Gamma \sim 10^{-22}$ Дж, из (3.42) получаем $\varepsilon \approx 3,2/\pi \cdot 10^{-3}$, то есть существование волн с амплитудами, обеспечивающими деформацию, близкую к пределу упругости (текучести), оказывается вполне возможным. Заметим, что при $\lambda/2 \sim 10^{-6}$ м и $\varepsilon \sim 10^{-3}$ амплитуда волны ($u = \varepsilon \lambda/4 \approx 5 \cdot 10^{-10}$ м $\approx 1,4a$) превышает параметр решетки.

Обсудим теперь применимость оценок, полученных из стационарных решений. Прежде всего необходимо оценить время жизни пространственно неоднородных распределений температуры и химического потенциала. Обозначая эти времена $t_{\nabla T}$, $t_{\nabla\mu}$ и учитывая, что „рассасывание“ неоднородности обусловлено процессами теплопроводности и диффузии, для времен t_{∇} имеем известную оценку, очевидную из соображений размерности

$$t_{\nabla T} \approx \frac{l_T^2}{d_T}, \quad t_{\nabla\mu} \approx \frac{l_{\mu}^2}{d_{\mu}}, \quad (3.43)$$

где $l_{T,\mu}$ - характерные масштабы неоднородности, определяющие значения $\nabla T \approx \Delta T \cdot l_T^{-1}$, $\nabla\mu \approx \Delta\mu \cdot l_{\mu}^{-1}$; d_T , d_{μ} - коэффициенты температуропроводности и диффузии, соответственно.

Типичное значение $d_T \approx 10^{-5}$ м²/с для $T > T_D$ легко получить из формулы, связывающей d_T с теплопроводностью λ_t , удельной теплоемкостью C_{sp} , плотностью ρ :

$$d_T = \frac{\lambda_t}{\rho C_{sp}}, \quad (3.44)$$

при $\lambda_t = 34$ Вт/мК, $\rho = 7900$ кг/м³, $C_{sp} \approx 4,6 \cdot 10^2$ Дж/кг·К (удельная теплоемкость взята согласно правилу Дюлонга-Пти, что оправдано при $T > T_D$).

Замечая, что d_μ - коэффициент пропорциональности, связывающий плотность потока электронов с градиентом их концентрации ∇n_γ в γ - фазе, выразим d_μ через удельную проводимость γ - фазы σ_γ . С этой целью, считая $\mu \sim n_\gamma^{2/3}$, преобразуем выражение для плотности тока

$$j = -\frac{\sigma_\gamma}{e} \nabla \mu = -\frac{2}{3} \frac{\sigma_\gamma \mu_\gamma}{e n_\gamma} \nabla n_\gamma. \quad (3.45)$$

Разделив левую и правую часть (3.45) на заряд электрона e , имеем

$$\frac{j}{e} = -\frac{2 \sigma_\gamma \mu_\gamma}{3 e^2 n_\gamma} \nabla n_\gamma \equiv -d_\mu \nabla n_\gamma, \quad d_\mu = \frac{2 \sigma_\gamma \mu_\gamma}{3 e^2 n_\gamma}. \quad (3.46)$$

Подставляя в (3.46) $\sigma_\gamma \approx 10^6 \text{ м}^{-1} \text{ Ом}^{-1}$, $n_\gamma = 10^{29} \text{ м}^{-3}$, $\mu_\gamma \approx 10 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$, находим $d_\mu \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$.

Очевидно, что использование при оценках ∇T , $\nabla \mu$ величин $\Delta T \sim 10^2 \text{ К} \sim (T_0 - M_S)$ и $\Delta \mu = |\mu_\alpha - \mu_\gamma| \approx 0,15 \text{ эВ}$ может быть оправдано, если время образования зародыша t_N меньше или порядка времени существования градиентов t_∇ . В противном случае процессы теплопроводности и диффузии сгладят температурный и концентрационный скачки на границе фаз. Принимая $t_N \sim 10^{-11} \text{ с}$ (см. обсуждение в п. 1.3), отвечающее в модели образования макрозародыша радиусу зародыша $r_N \sim 10^{-5} \text{ см}$ и скорости перемещения границы зародыша $V \sim 10^3 \text{ м/с}$, находим с помощью (3.43) минимальные значения $(l_T)_{\min}$ и $(l_\mu)_{\min}$ из требования $t_N = t_\nabla$:

$$(l_T)_{\min} = (t_N d_T)^{1/2} \sim 10^{-8} \text{ м},$$

$$(l_\mu)_{\min} = (t_N d_\mu)^{1/2} \sim 6 \cdot 10^{-8} \text{ м}.$$

Таким образом, при стационарной оценке величины $\nabla \mu$ естественным масштабом является $l_\mu \sim 10^{-7} \text{ м}$. Напомним, что аналогичный вывод (но на основе иных соображений) был получен в конце п. 3.1.

Вопрос о применимости стационарной оценки для амплитуд $u = u_{st}$ и деформаций $\varepsilon = \varepsilon_{st}$ является более сложным. Действительно, переход к практически стационарным значениям u , ε за

некоторое характерное время $t_u = t_\varepsilon$ не будет зависеть от значений u_0, ε_0 в начальный момент времени t_0 , если $t_u \ll t_\nabla$, то есть в данном случае возможен мягкий режим возбуждения волн с $u_0 \ll u_{st}, \varepsilon_0 \ll \varepsilon_{st}$. Если $t_u \gg t_\nabla$, реализация значений $u \approx u_{st}$ и $\varepsilon_0 \approx \varepsilon_{st}$ при мягком режиме возбуждения невозможна, и, значит, использование стационарной оценки справедливо лишь при жестком режиме возбуждения $u_0 \leq u_{st}, \varepsilon_0 \leq \varepsilon_{st}$. Разумеется, если $u_0 > u_{st}, \varepsilon_0 > \varepsilon_{st}$, то стационарная оценка дает нижнюю границу значений u, ε (при $\sigma_0 > \sigma_{th1}$).

Чтобы оценить t_u нужно знать нестационарное решение $\tilde{b}(t)$. В общем случае его найти не удастся, однако вблизи порога одномодовой генерации уравнение для \tilde{b} сводится к уравнению Ван-дер-Поля (см., например, §(3,а) в лекциях Хакена-Вайдлиха [132]):

$$\left(\frac{d}{dt} - D \right) \tilde{b}^+ + \beta \tilde{b}^+ \tilde{b} \tilde{b}^+ = 0,$$

$$D = \varkappa \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th1}} - 1 \right), \quad \beta = \frac{4 t_\sigma \varkappa |W_1|^2 \sigma_0}{\Gamma \sigma_{th1} \hbar^2}. \quad (3.47)$$

Формально уравнение Ван-дер-Поля получается, если в системе (3.7) восстановить производную по времени только для величин $\tilde{b}_q^+, \tilde{b}_q$, записывая в правую часть первого уравнения (3.7) вместо нуля $\dot{\tilde{b}}_q^+$ и сохраняя неизменными остальные уравнения (адиабатическое приближение, означающее, что излучающая подсистема мгновенно подчиняется параметру порядка \tilde{b}_q), затем следует исключить \tilde{d}, σ и провести разложение возникающего множителя

$$\left[1 + \frac{4 t_\sigma |W_1|^2}{\hbar^2 \Gamma} \tilde{b}_q^+ \tilde{b}_q \right]^{-1} \approx 1 - \frac{4 t_\sigma |W_1|^2}{\hbar^2 \Gamma} \tilde{b}_q^+ \tilde{b}_q \quad (3.48)$$

с точностью до линейного по $\tilde{b}_q^+ \tilde{b}_q$ члена. Заметим, что, поскольку при отыскании стационарного уравнения для \tilde{b}_q^+ мы уже проводили исключение дипольного момента \tilde{d} и разности населенностей σ , можно сразу воспользоваться уравнением (3.11), из которого нестационарное уравнение для \tilde{b}_q^+ в адиабатическом приближении

получается домножением на $-\varkappa_{\mathbf{q}}$ и добавлением $\dot{\tilde{b}}_{\mathbf{q}}^+$ в левую часть:

$$\dot{\tilde{b}}_{\mathbf{q}}^+ = \varkappa_{\mathbf{q}} \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \left[\frac{\sigma_0}{\sigma_{th1}} \left(1 + \frac{4 t_{\sigma} |W_1|^2 \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \tilde{b}_{\mathbf{q}}}{\hbar^2 \Gamma} \right)^{-1} - 1 \right] \equiv -\chi \tilde{b}_{\mathbf{q}}^+. \quad (3.49)$$

Из (3.49) при учете (3.48) сразу следует (3.47). Уравнение (3.49) мы еще используем в главе 6, а пока вернемся к более простому уравнению (3.47).

Допуская, что в начальный момент времени $t = 0$ за счет флуктуаций \tilde{b} принимает значение \tilde{b}_0 , из (3.47) имеем:

$$\tilde{b} = \left[\left(\frac{1}{b_0^2} - \frac{\beta}{D} \right) e^{-2Dt} + \frac{\beta}{D} \right]^{-1/2}. \quad (3.50)$$

Из (3.50) следует, что при $D > 0$, $t \rightarrow \infty$, $\tilde{b} \rightarrow (D/\beta)^{1/2} \neq 0$, а при $D < 0$, $t \rightarrow \infty$, $\tilde{b} \rightarrow 0$. Из (3.50) видно, что единственное характерное время:

$$t_u = (2D)^{-1}. \quad (3.51)$$

Отметим, что стремление t_u к бесконечности при $\sigma_0 \rightarrow \sigma_{th1}$ вполне аналогично критическому замедлению флуктуации параметра порядка при подходе к температуре фазового перехода второго рода.

Хотя при значительном превышении над порогом уравнение Ван-дер-Поля неприменимо, оценку порядка величины t_u можно провести по формуле (3.51). Полагая затухание $\varkappa \approx (10^{-4} \div 10^{-3})\omega$, согласно (3.16), видим, что при $(\sigma_0 \sigma_{th}^{-1} - 1)$ порядка единицы время t_u , оцененное с помощью (3.51), не может быть меньше $(10\varkappa)^{-1}$. Это означает, что для интересующего нас диапазона частот $\omega \sim (10^{10} \div 10^{11}) \text{ с}^{-1}$, $t_u \geq (10^{-8} \div 10^{-9}) \text{ с}$, и выполняется неравенство $t_u \gg t_{\nabla}$, из которого, согласно проведенному выше обсуждению, вытекает правомерность стационарных оценок для u , ε по формулам (3.41), (3.42) только при жестком режиме возбуждения $u_0 \leq u_{st}$, $\varepsilon \leq \varepsilon_{st}$.

3.4 Заключение к главе 3

На основе анализа уравнений для неравновесной электрон-фононной системы, проведенного выше, можно сделать следующие выводы.

1. Ведущую роль в генерации продольных волн смещений решетки играют электрон-фононные процессы с участием одного фонона; роль многофононных процессов сводится к усилению волн.
2. Генерация осуществляется относительно долгоживущими электронами с временем жизни $\tau_0 \geq 10^{-12}$ с.
3. Из двух источников неравновесности электронной подсистемы, характеризующихся наличием ∇T и $\nabla \mu$, в генерации длинноволновых фононов ($q \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$) эффективнее источник, обусловленный неоднородностью химического потенциала.
4. При наличии обширных по площади приведенных листов S-поверхностей ($\Sigma_S \geq (\pi/a)^2$) со слабой дисперсией энергии вблизи значений μ и значениях $\nabla \mu \sim 10^6$ эВ/м (10^{10} К/м в температурной шкале) возможна генерация продольных волн, обеспечивающих деформацию $\varepsilon \sim 10^{-3}$, близкую к пределу упругости.
5. Для характерных временных масштабов можно предложить следующую цепочку неравенств

$$t_u \gg t_\nabla > t_N > \tau_0 \sim t_\sigma, \quad (3.52)$$

центральное звено которой $t_\nabla > t_N$, устанавливающее соотношение между t_∇ - временем жизни ∇T , $\nabla \mu$ и временем образования макрозародыша $t_N \geq 10^{-11}$ с, определяет минимальные пространственные масштабы $l_T \sim 10^{-8}$ м, $l_\mu \sim 10^{-7}$ м для стационарных оценок $\nabla T = \Delta T \cdot l_T^{-1}$, $\nabla \mu = \Delta \mu \cdot l_\mu^{-1}$, а первое звено $t_u \gg t_\nabla$ показывает, что реализация уровня деформации, получаемого из оценки (3.42) для стационарных условий,

возможна лишь при жестком режиме возбуждения волн. В рамках развиваемой модели мартенситного $\gamma - \alpha$ превращения как деформационного процесса, управляемого волнами, несущими пороговую деформацию $\varepsilon_{th} \sim 10^{-3}$, это означает, что пороговый уровень ε_{th} должен возникать в начальный для стадии роста момент времени $t_0 = t_N$. Данный вывод хорошо согласуется с трактовкой (см. п. 1.3 и пункт 1 постановки задачи в п. 1.5) наблюдаемого глубокого переохлаждения γ -фазы ниже температуры T_0 равновесия фаз (существенно избыточного с точки зрения компенсации энергетических затрат на образование границы раздела фаз и поля статических упругих искажений) как необходимого условия для возбуждения при зародыщеобразовании колебаний с амплитудами, обеспечивающими деформацию $\varepsilon_0 \sim 10^{-3}$, достаточную для преодоления порога, разделяющего метастабильно устойчивое состояние с ГЦК-решеткой от стабильного (при $T = M_S$) с ОЦК-решеткой.

Проведенное в главе 3 изложение основывалось, главным образом, на работах [140, 141] и, в меньшей степени, [56], корректировка результатов которых в тексте главы относилась в основном к замене упрощенной модели изоэнергетических Р-плоскостей S-поверхностями и уточнению количественных оценок, носившему в [140, 141] преимущественно иллюстративный характер.

Сделаем ряд замечаний

1. Задачи построения кинетических уравнений для неравновесной электрон-фононной системы и анализа пороговых условий одномодовой генерации в модели изоэнергетических Р-плоскостей при неоднородном распределении температуры в рамках метода неравновесного статистического оператора Зубарева-Калашникова [142–144] решались в работах [145–149] и были подытожены в [150]. Полученные в этих работах результаты, касающиеся $\gamma - \alpha$ превращения, в качественном отношении аналогичны результатам п. 3.1, и их

можно рассматривать как обоснование полуперифеноменологического подхода, в котором диссипативные процессы учитываются введением релаксационных постоянных. Кроме того, в [149, 150] показано, что система уравнений в смешанном координатно-импульсном представлении, получающаяся при разложении макропеременных f , σ , d , b по степеням градиентов, с точностью до первых исчезающих членов принимает пространственно-локальный вид, совпадающий с (3.3), где, однако, макропеременные σ , d , b следует считать функциями координаты x в направлении неоднородности \mathbf{e} . Такое представление подчеркивает, что при наличии электронных потоков в системе вероятность обнаружить электрон в объеме прямого пространства вблизи точки x существенно зависит от ориентации групповой скорости \mathbf{v} электрона относительно \mathbf{e} , и в одной и той же точке пространства могут существовать состояния с инверсной населенностью. Пространственно-локальный характер описания оправдывает применимость результатов, полученных на основе квазиимпульсного представления, для анализа неравновесной ситуации вблизи границы новой фазы.

2. Дрейфовый механизм создания инверсно населенных состояний хорошо известен и использовался в экспериментах по усилению и генерации упругих волн в полупроводниках (см., например, [151, 152]). Обычно внимание акцентируется на том, что необходимое для генерации условие состоит в превышении дрейфовой скорости электронов \mathbf{v}_d над звуковой c , то есть оно совпадает с условием черенковского излучения дрейфующими электронами фононов. В наших обозначениях условие $v_d > c$ эквивалентно $\sigma_0 > 0$ - более слабому требованию по сравнению с $\sigma_0 > \sigma_{th1}$. Действительно, из (3.24), например, видно, что условие $\sigma_0 > 0$ эквивалентно

$$(\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \tau \vec{\nabla} \mu > \hbar \omega_{\mathbf{q}} = \hbar c q. \quad (3.53)$$

Учитывая, что состояния \mathbf{k}, \mathbf{k}' локализованы вблизи S -поверхности и закон дисперсии для них при движении от

S-поверхности в направлении, коллинеарном \mathbf{e} , квадратичен (см. главу 2), имеем

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} &= \hbar [\mathbf{s} - \mathbf{k}' - (\mathbf{s} - \mathbf{k})] |m|_s^{-1} = \\ &= \hbar (\mathbf{k} - \mathbf{k}') |m|_s^{-1} = \hbar \mathbf{q} |m|_s^{-1},\end{aligned}\quad (3.54)$$

где \mathbf{s} - вектор, нумерующий точку пересечения вектора $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ с S-поверхностью, $|m|_s^{-1}$ - обратная эффективная масса в точке \mathbf{s} . Подставляя (3.54) в (3.53), получаем условие черенковского излучения:

$$v_d = \tau \nabla \mu |m|_s^{-1} > c. \quad (3.55)$$

При $\nabla \mu \sim 10^6$ эВ/м = $1,6 \cdot 10^{-13}$ Дж/м, $\tau \sim 10^{-12}$ с, $|m|_s \approx 3 m_0 \sim 3 \cdot 10^{-30}$ кг, имеем $v_d \approx 5 \cdot 10^4$ м/с, на порядок превышающее скорость продольных волн и достаточное для выполнения порогового условия $\sigma_0 > \sigma_{th1}$ в области температур $T \sim 10^3$ К. Реализация же волн, несущих деформацию $\varepsilon_0 \geq 10^{-3}$, требует в несколько раз больших значений $\nabla \mu$ и, соответственно, $v_d \sim 10^5$ м/с. Диапазон $v_d \sim (10^4 \div 10^5)$ м/с обычен и для полупроводников [151]. Заканчивая сравнение, уместно напомнить, что кроме значительных скоростей дрейфа для генерации упругих волн в полупроводниках существенны большие значения матричного элемента электрон-фононного взаимодействия (полупроводники-пьезоэлектрики); в случае $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения это взаимодействие не является большим, зато велико число пар $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ активных электронных состояний, тогда как в полупроводниках этот фактор мал. Разумеется, ни дрейфовый механизм накачки, ни наличие проводимости не являются единственно необходимыми при создании фононного мазера. Известны и другие мазерные схемы (см., например, [136, 153, 154]).

3. Отметим, наконец, что в инверсно населенной излучающей системе помимо индуцированного возможно и коллективное спонтанное излучение - сверхизлучение Дике с интенсивностью, пропорциональной квадрату числа пар активных состояний (см., например, [134, 154, 155]). Однако, поскольку время

для развития сверхизлучения должно быть меньше времени релаксации дипольного момента $\Gamma^{-1} \sim \tau_0$, генерация импульса сверхизлучения на частотах фононов $\nu < \tau_0^{-1}$ невозможна. Поэтому, считая $\tau_0 \sim 10^{-12}$ с, не имеет смысла обсуждать этот эффект применительно к излучению фононов с квазиимпульсами $q \sim (10^{-3} \div 10^{-2})\pi/a$, частоты которых $\nu_q < \tau_0^{-1}$. Таким образом, для фононов указанного диапазона волновых векторов ведущим остается мазерный механизм генерации.

Глава 4

Согласование концентрационной зависимости температуры $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения и оптимальной температуры генерации в сплавах на основе железа

4.1 Постановка задачи

Проведенный выше анализ показывает, что на стадии роста мартенсита возможно существование волн смещений решетки с амплитудами деформации $\varepsilon \sim 10^{-3}$. Поскольку оценка выполнения пороговых условий проводилась в области высоких температур, когда частота столкновений с коротковолновыми фононами велика, естественно предположить, что она по порядку величины пригодна не только для железа, но и для сплавов на его основе. Однако возможность выполнения оптимальных условий генерации в широком диапазоне концентраций легирующего элемента (например, до 10% Mn или до 34% Ni) и углерода (до 1,8 вес.%) требует специального обоснования. Действительно, с одной стороны, поддержание высокого уровня разности населенностей σ_0 требует, согласно (3.23), (3.24), чтобы значения параметра $y = (\varepsilon - \mu)(k_B T)^{-1}$ не превышали нескольких единиц, поскольку при увеличении y быстро уменьша-

ется множитель $|\partial f^0/\partial y|$ (см. табл. 3.1), а с ним и величина σ_0 . С другой стороны, при увеличении концентрации Ni уменьшается температура M_S начала $\gamma - \alpha$ превращения (практически до $M_S \approx 0$ K при 34% Ni) и значение y должно расти, так как веских оснований для предположения об уменьшении $\varepsilon - \mu$, сопровождающем уменьшение T и обеспечивающем практическое постоянство или уменьшение параметра y , не имеется.

Допущение о справедливости модели жесткой зоны, согласно которой добавление Ni должно уменьшать $\varepsilon - \mu$ из-за поступления в зону избыточных (по два на атом Ni) электронов, не может служить опорой, поскольку применительно к системе Fe - Mn эта модель приводит к выводу об увеличении $\varepsilon - \mu$, а значит, к необходимости повышения температуры M_S . Реально же для систем Fe - Ni (до 28% Ni) и Fe - Mn (до 10% Mn) с однофазным $\gamma - \alpha$ превращением (пакетный мартенсит) при росте концентрации легирующих элементов температура M_S падает в обоих случаях, причем быстрее при добавлении Mn. Так, сравнение данных [7] и [156] показывает, что снижение M_S до уровня 500 K требует добавления 20% Ni либо только 10% Mn.

Характеризуя энергии состояний электронов 3d-зоны на S-поверхности некоторым средним значением ε_d (см. пояснение к формуле (3.9)), в качестве альтернативы к модели жесткой зоны примем, что в сплавах (типа замещения) железа с близкими соседями по 3d ряду переходных металлов $\varepsilon_d - \mu$ слабо зависит от состава, сохраняя значение, присущее чистому железу в γ -фазе. Это означает, что легирующий элемент формирует свои 3d-подзоны, перекрывающиеся по энергии с 3d-зонами железа, и перетекание заряда между компонентами сплава отсутствует (гипотеза минимальной полярности [100]). Примем также, что величина пороговой разности населенностей σ_{th} сохраняет в сплавах, испытывающих мартенситное превращение, не превышающее 10^{-3} значение, найденное при высокотемпературной оценке для железа. Тогда выполнение порогового условия $\sigma_0 > \sigma_{th}$ в широком диапазоне концентраций $C_{л.э.}$ легирующих элементов можно обосновать в рамках двухзонной модели, полагая, что затухание подвижных s-электронов Γ

сравнимо с величиной $(\varepsilon_d - \mu)\hbar^{-1}$ и во много раз превышает затухание Γ_d 3d-электронов, активных в генерации фононов (типичному для 3d-металлов времени жизни s-электронов $\tau_s \sim 10^{-15}$ с отвечает $\hbar \Gamma_s \sim 0,6$ эВ). Действительно, населенность состояний с энергией $\varepsilon_d > \mu$ может поддерживаться на достаточно высоком уровне $f_d^0 \geq 0,1$ за счет эффективного механизма рассеяния в d-состояния s-электронов с энергиями ε_s , удовлетворяющими условию

$$\varepsilon_d - \mu - \frac{\hbar \Gamma_s}{2} < \varepsilon_s - \mu + \hbar \omega < \varepsilon_d - \mu + \frac{\hbar \Gamma_s}{2}, \quad (4.1)$$

где $\hbar \omega$ -энергия коротковолнового фонона, участие которого необходимо для выполнения закона сохранения импульса, если неопределенность импульса s-электронов мала (мы пренебрегли в (4.1) величиной $\hbar \Gamma_d$ по сравнению с $\hbar \Gamma_s$). Поэтому для больших Γ_s уровень теплового возбуждения $k_B T \sim (\varepsilon_s - \mu)$ может быть значительно меньше $\varepsilon_d - \mu$ без уменьшения населенности d-состояний. Аналогично для состояний ε_d под уровнем Ферми при $\mu - \varepsilon_d > k_B T$ механизм d-s рассеяния обеспечивает дополнительное к уровню теплового возбуждения размытие распределения d-электронов, приводящее к отличию населенностей d-состояний от единицы.

Отсюда ясно, что рост концентрации C легирующей добавки ($C < 1/2$), приводящий к быстрому росту вклада $\Gamma_s(C) \sim C(1-C)$ примесного рассеяния в Γ_s , согласуется с уменьшением температуры условием:

$$\hbar \omega + k_B T + \frac{\hbar \Gamma(C, T)}{2} \sim |\varepsilon_d - \mu|. \quad (4.2)$$

Отметим, что существование зависящего от температуры вклада $\Gamma_s(T)$, связанного с рассеянием на термически активируемых неоднородностях (вакансии, фононы, магноны и т.п.) и убывающего при снижении T , должно сглаживать поведение $\Gamma_s(C, T)$, стабилизируя уровень размытия распределения d-электронов в широком диапазоне T и C . Следовательно, в первую очередь, необходимо модифицировать вид равновесной функции распределения $f^0 \rightarrow \tilde{f}^0$ так, чтобы \tilde{f}^0 одновременно учитывала размытие распределения, обусловленное факторами T и Γ , а затем исследовать поведение

производных $\partial \tilde{f}^0 / \partial \mu$, $\partial \tilde{f}^0 / \partial T$, определяющих, наряду со значениями градиентов $\nabla \mu$, ∇T , величину разности населенностей σ_0 . По существу, необходимо найти область переменных T и Γ , для которой величина σ_0 при фиксированном $|\varepsilon_d - \mu|$ достигает максимальных значений, достаточно слабо изменяющихся при одновременном изменении T и Γ . Температуру T из этой области естественно определить как оптимальную \tilde{T} для протекания мартенситного превращения. Затем, если известны электронные конфигурации атомов матрицы и легирующего элемента, можно найти зависимость $\tilde{T}(C)$, вычисляя $\Gamma_s(C)$ и устанавливая связь \tilde{T} с $\Gamma(C, \tilde{T})$, и сравнить концентрационные зависимости $\tilde{T}(C)$ и $M_S(C)$. Можно решать и обратную задачу: требуя близости зависимостей $\tilde{T}(C)$, $M_S(C)$ и выбирая в качестве реперной электронную конфигурацию одного из компонентов сплава, искать электронную конфигурацию атома другого компонента. Именно последняя постановка задачи, позволяющая извлекать дополнительную информацию, используется в четвертой главе при сравнении зависимостей $\tilde{T}(C)$ и $M_S(C)$ для сплавов типа замещения (Fe - Ni, Fe - Co, Fe - Mn) и внедрения (Fe - C).

4.2 Модифицированное распределение электронов и его производные в случае прямоугольной формы спектральной плотности

Неупорядоченный бинарный твердый раствор замещения можно рассматривать как среду с идеальной (периодической) кристаллической решеткой, вероятность заполнения узлов которой атомами одной из двух компонент равна C и $1 - C$, где C - концентрация растворяемого компонента. Отсутствие дальнего порядка, обусловленное статистическим характером одноузельного потенциала, приводит к тому, что состояния с заданным квазиимпульсом становятся нестационарными. Поэтому один из подходов к описанию сплавов замещения как некоторой „эффективной“ периодической среды заключается во введении эффективного неэрмитова гамильтониана

с комплексными собственными значениями, мнимая часть которых определяет затухание одноэлектронных состояний [100]. Вычисление средних от электронных операторов включает как термодинамическое, так и конфигурационное усреднения, которые, при отсутствии в системе ближнего порядка, проводятся независимо. В частности, интересующее нас модифицированное распределение электронов \tilde{f}^0 дается выражением

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} [1 + \exp(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T})]^{-1} A(\varepsilon, \mathbf{k}) d\varepsilon, \quad (4.3)$$

где спектральная плотность $A(\varepsilon, \mathbf{k})$ является средней (по конфигурациям) вероятностью обнаружить в сплаве электрон с энергией ε в состоянии с квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$. Обычно спектральная плотность имеет лоренцеву форму:

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \hbar \Gamma_{\mathbf{k}} \left[(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + \left(\frac{1}{2} \hbar \Gamma_{\mathbf{k}} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (4.4)$$

где $\Gamma_{\mathbf{k}}$ - затухание электрона в состоянии с энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, совпадающее с шириной на половине высоты функции $A(\varepsilon, \mathbf{k})$. Кроме того, выполняется условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\varepsilon, \mathbf{k}) d\varepsilon = 1. \quad (4.5)$$

Из (4.4), (4.5) очевидно, что при $\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ спектральная плотность переходит в δ - функцию

$$\lim_{\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} A(\varepsilon, \mathbf{k}) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (4.6)$$

а распределение (4.3) в распределение Ферми-Дирака

$$\lim_{\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = f_{\mathbf{k}}^0 = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (4.7)$$

Это вполне естественно, так как условие $\Gamma_{\mathbf{k}} = 0$ эквивалентно восстановлению дальнего порядка в системе - переходу от двух-компонентного сплава к однокомпонентной системе ($C = 0$).

Простое аналитическое выражение для $\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0$ можно найти при выборе спектральной плотности в форме прямоугольника с высотой $(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})^{-1}$ и шириной $\Gamma_{\mathbf{k}}$, симметричного относительно энергии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$:

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar\Gamma_{\mathbf{k}}} \left\{ \Theta \left[\varepsilon - \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{\hbar\Gamma_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] - \Theta \left[\varepsilon - \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar\Gamma_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] \right\}, \quad (4.8)$$

где Θ - единичная функция Хевисайда

$$\Theta(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon \geq 0, \\ 0 & \varepsilon < 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Подставляя (4.8) в (4.3), получаем

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = 1 + \frac{1}{2\eta_{\mathbf{k}}} \ln \left[\frac{1 + \exp(y_{\mathbf{k}} - \eta_{\mathbf{k}})}{1 + \exp(y_{\mathbf{k}} + \eta_{\mathbf{k}})} \right]. \quad (4.10)$$

Нетрудно проверить, что для (4.10) выполняется предельный переход (4.7), а в случае низких температур $T \rightarrow 0$ получаем

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = \begin{cases} 1 & \varepsilon_{\mathbf{k}} < \mu - \frac{(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})}{2} \\ \frac{1}{2} + (\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})^{-1} & \mu - \frac{(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})}{2} \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq \mu + \frac{(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})}{2} \\ 0 & \mu - \frac{(\hbar\Gamma_{\mathbf{k}})}{2} < \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{cases} \quad (4.11)$$

распределение с шириной размытия $\hbar\Gamma_{\mathbf{k}}$, изображенное на рис. 4.1. Выполняется и обычное для распределения электронов условие $\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = 1/2$ при $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mu$ независимо от величины T . Пренебрегая в дальнейшем зависимостью затухания Γ от \mathbf{k} , что соответствует приближению когерентного потенциала [100], видим, что $\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0$ остается постоянной на изоэнергетических поверхностях $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \text{const}$ в пространстве квазиимпульсов, так как $\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = \tilde{f}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$. Соответственно, для спектральной функции используем обозначение $A(\varepsilon, \mathbf{k}) = A(\varepsilon, \varepsilon_{\mathbf{k}})$.

Считая функцию (4.3) задающей энергетическое распределение s-электронов в сплаве $\tilde{f}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}s}) \equiv \tilde{f}_{\mathbf{k}s}^0$, покажем, что при наличии d-с механизма рассеяния с участием коротковолновых фононов равновесная функция распределения $\tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0 = \tilde{f}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d})$ для d-электронов с энергией ε_d в сплаве приближенно равна функции $\tilde{f}^0(\varepsilon_s)$ при той же энергии $\varepsilon_s = \varepsilon_d$. Модификация стандартного интеграла электрон-фоонных столкновений, обусловленная учетом примесного рассеяния, сводится, согласно [157], к замене δ - функции, отражающей строгое выполнение закона сохранения энергии, лоренцевой функцией:

$$\left(\frac{\partial \tilde{f}_{\mathbf{k}d}}{\partial t} \right)_{col} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{p}} |W_{\mathbf{p}}|^2 \{ A(\varepsilon_{\mathbf{k}'s}, \varepsilon_{\mathbf{k}d} + \hbar\omega_{\mathbf{p}}) \times \quad (4.12)$$

$$\times [N_{\mathbf{p}}(f_{\mathbf{k}'s} - \tilde{f}_{\mathbf{k}d}) + f_{\mathbf{k}'s}(1 - \tilde{f}_{\mathbf{k}d})] +$$

$$+ A(\varepsilon_{\mathbf{k}'s}, \varepsilon_{\mathbf{k}d} - \hbar\omega_{\mathbf{p}})[N_{\mathbf{p}}(f_{\mathbf{k}'s} - \tilde{f}_{\mathbf{k}d}) - \tilde{f}_{\mathbf{k}d}(1 - f_{\mathbf{k}'s})] \},$$

где $|W_{\mathbf{p}}|$ - модуль матричного элемента электрон-фоонного взаимодействия, $N_{\mathbf{p}}$ - функция распределения фононов. Переходя к интегрированию по $\varepsilon_{\mathbf{k}'s}$, учтем определения (4.3), (4.5) и потребуем, для отыскания равновесного распределения $\tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0$, равенства нулю интеграла столкновений (4.12). Тогда имеем приближенно

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0 \approx \frac{\tilde{f}_s^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d} + \hbar\omega_{\mathbf{p}}) + [\tilde{f}_s^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d} + \hbar\omega_{\mathbf{p}}) + \tilde{f}_s^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \hbar\omega_{\mathbf{p}})] N_{\mathbf{p}}}{2 N_{\mathbf{p}} + 1 + [\tilde{f}_s^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d} + \hbar\omega_{\mathbf{p}}) - \tilde{f}_s^0(\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \hbar\omega_{\mathbf{p}})]}. \quad (4.13)$$

Разлагая (4.13) по степеням $\omega' = \hbar\omega_{\mathbf{p}}(\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \mu)^{-1}$ в нулевом приближении находим

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0 \approx \tilde{f}_s^0(\varepsilon_d). \quad (4.14)$$

Линейную добавку к правой части (4.14)

$$\frac{\partial \tilde{f}_s^0(\varepsilon_d)}{\partial(\varepsilon_d - \mu)} (1 - 2\tilde{f}_s^0(\varepsilon_d)) \hbar\omega_{\mathbf{p}}$$

с помощью (4.10) запишем в виде

$$\frac{1}{2\Gamma'} \frac{\sinh \Gamma'(T')^{-1}}{\cosh \Gamma'(T')^{-1} + \cosh (T')^{-1}} (1 - 2\tilde{f}_s^0) \omega', \quad (4.15)$$

где

$$\Gamma' = \frac{\hbar \Gamma}{2(\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \mu)}, \quad T' = \frac{k_B T}{\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \mu}. \quad (4.16)$$

При $\varepsilon_{\mathbf{k}d} - \mu \approx 0,2$ эВ и ω_p -порядка половины частоты Дебая $\omega' \leq 10^{-1}$. Порядка 0,1 и произведение остальных множителей в (4.15), так что линейная по ω' поправка как минимум на порядок меньше (4.14). Поэтому при исследовании неравновесных добавок к функции \tilde{f}_d

$$\Delta \tilde{f}_{\mathbf{k}d}(\nabla \mu) \approx \frac{\partial \tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0}{\partial \mu'} \frac{\tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \vec{\nabla} \mu}{\varepsilon_d - \mu}, \quad \mu' = \frac{\mu}{\varepsilon_d - \mu}, \quad (4.17)$$

$$\Delta \tilde{f}_{\mathbf{k}d}(\nabla T) \approx \frac{\partial \tilde{f}_{\mathbf{k}d}^0}{\partial T'} \frac{\tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \vec{\nabla} T k_B}{\varepsilon_d - \mu},$$

в качестве \tilde{f}_d^0 можно использовать функцию \tilde{f}_s^0 (4.3) при $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}d}$. Полагая такую замену выполненной, ниже будем опускать индексы d, ноль и тильду у функции $\tilde{f}_d^0 \rightarrow f$. Фиксируя в (4.17) значения $\tau \mathbf{v} \vec{\nabla} \mu$, $\tau \mathbf{v} \vec{\nabla} T$, для отыскания оптимальных значений Γ и T (см. п. 4.1) достаточно исследовать производные $\partial f / \partial T'$, $\partial f / \partial \mu'$ в зависимости от безразмерных переменных Γ' , T' (4.16), использование которых удобно, так как значение $\varepsilon_d - \mu$, в связи с предположением п. 4.1, остается постоянным. В случае спектральной плотности (4.8), производные $\partial f / \partial T'$, $\partial f / \partial \mu'$ получаем из (4.10) прямым дифференцированием:

$$\frac{\partial f}{\partial T'} = \frac{1}{2\Gamma'} \left\{ \ln \left[\frac{1 + \exp(y - \eta)}{1 + \exp(y + \eta)} \right] + \frac{y \sinh \eta + \eta (\cosh \eta + \exp y)}{\cosh y + \cosh \eta} \right\}, \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mu'} = \frac{1}{2\Gamma'} \frac{\sinh \eta}{\cosh y + \cosh \eta}, \quad (4.19)$$

где $\eta = \Gamma' T'^{-1}$, $y = T'^{-1}$.

На рис. 4.2, 4.3 представлены результаты расчета $\partial f / \partial \mu'$ и $\partial f / \partial T'$ по формулам (4.19), (4.18). Семейства тонких линий - это линии постоянного уровня, на которых функции $\partial f / \partial \mu'$, $\partial f / \partial T'$

принимают постоянные (отмеченные на линиях) значения, а штриховые линии 1 и 2 определяются соответственно условиями

$$\frac{\partial}{\partial T'} \left(\frac{\partial f}{\partial \mu'} \right) \Big|_{\Gamma'} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \Gamma'} \left(\frac{\partial f}{\partial \mu'} \right) \Big|_{T'} = 0. \quad (4.20)$$

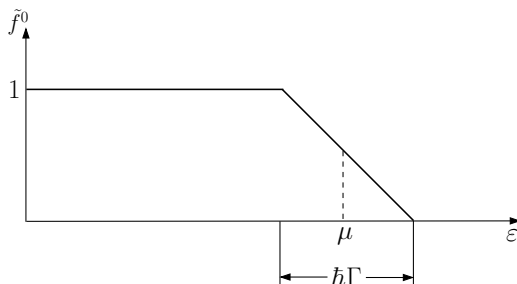


Рис. 4.1. Модифицированная функция распределения электронов при температуре 0 К

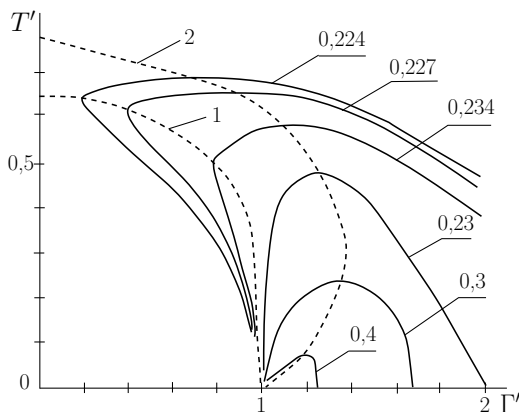


Рис. 4.2. Результаты расчета функции $\partial f / \partial \mu'$ на плоскости переменных (Γ', T') , в случае прямоугольной формы спектральной плотности: — — — линии, на которых функция $\partial f / \partial \mu'$ принимает постоянные значения; линии 1 и 2 определены в тексте

Эти линии отвечают максимумам функции $\partial f / \partial \mu'$, $\partial f / \partial T'$ по переменным T' и Γ' и проходят через точки, в которых прямые линии, параллельные соответственно вертикальной и горизонтальной

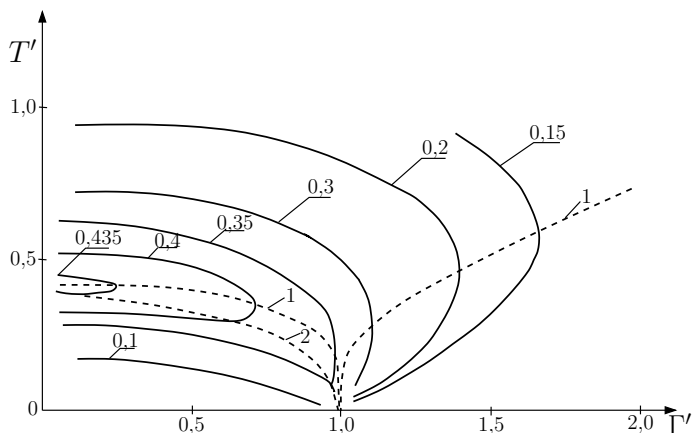


Рис. 4.3. Результаты расчета функции $\partial f/\partial T'$ на плоскости переменных (Γ', T') в случае прямоугольной формы спектральной плотности: — - изолинии

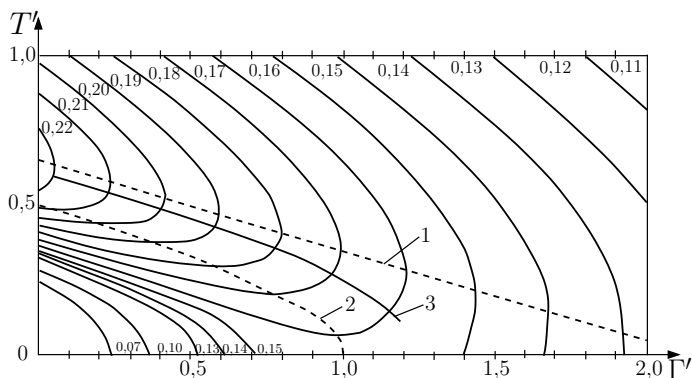


Рис. 4.4. Результаты расчета функции $\partial f/\partial \mu'$ на плоскости переменных (Γ', T') в случае лоренцевой формы спектральной плотности: — - изолинии

осям координат, касаются линий постоянного уровня. На рис. 4.2 область между линиями 1 и 2 представляет собой область значений параметров T и Γ , для которых инверсная разность населенностей $\sigma_0(\nabla\mu)$ достигает максимальных слабо изменяющихся (при изменении T и Γ) значений. Очевидно, что, задавая точку, отвечающую чистому железу внутри этой области, можно ввести оптимальную

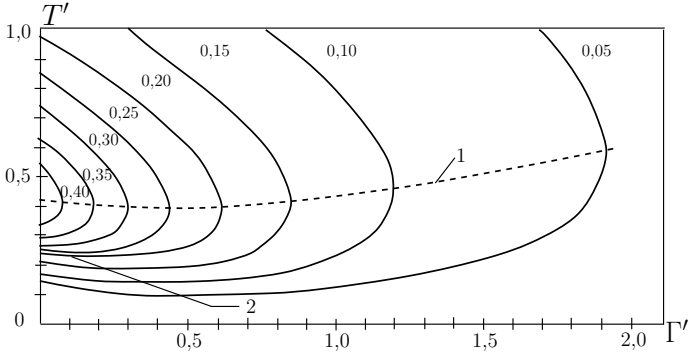


Рис. 4.5. Результаты расчета функции $\partial f/\partial T'$ на плоскости переменных (Γ', T') в случае лоренцевой формы спектральной плотности: — - изолинии

температуру для генерации фононов, убывающую с ростом затухания Γ . Таким образом, поведение производной $\partial f/\partial \mu'$ указывает на возможность введения оптимальной температуры \tilde{T}_1 , для которой производная $\partial \tilde{T}_1/\partial C_{\text{л.э.}} < 0$, где $C = C_{\text{л.э.}}$ - концентрация легирующего элемента. Скачок значений функции $\partial f/\partial \mu'$ от 0 до 0,5 при переходе от $\Gamma' < 1$ к $\Gamma' > 1$ (в точке $\Gamma' = 1$ $\partial f/\partial \mu' = 0,25$) при $T' \rightarrow 0$ легко усмотреть из формулы (4.19), принимающей при $T' \rightarrow 0$ вид:

$$\frac{\partial f}{\partial \mu'} \approx \frac{1}{2\Gamma'[1 + \exp(1 - \Gamma')(T')^{-1}]}$$

Этот скачок обусловлен предельно резким убыванием модельной спектральной плотности (4.8) при отклонении от энергии $\epsilon_{\mathbf{k}}$ на $\pm 1/2\Gamma_{\mathbf{k}}$, и нет оснований ожидать его появления при более плавном поведении $A(\epsilon, \epsilon_{\mathbf{k}})$.

Основное отличие поведения $\partial f/\partial T'$ от $\partial f/\partial \mu'$, как это видно из сравнения рис. 4.3 и рис. 4.2, заключается в существовании при $\Gamma' > 1$, восходящего участка линии 1, который мог бы служить основой для введения оптимальной температуры генерации \tilde{T}_2 , возрастающей при росте $C_{\text{л.э.}}$: $\partial \tilde{T}_2/\partial C_{\text{л.э.}} > 0$. Поскольку резкий „провал“ при $\Gamma' \rightarrow 1$, $T' \rightarrow 0$ на линии 1 (в точке $\Gamma' = 1$, $T' = 0$, $\partial f/\partial T' = 1/2 \ln 2 \approx 0,347$) обусловлен отмечавшейся уже особенностью спектральной плотности (4.8), можно ожидать

его исчезновения при переходе к плавно меняющимся функциям $A(\varepsilon, \varepsilon_{\mathbf{k}})$ и расширения восходящего участка линии 1. Отметим также, что величина $\partial f / \partial T'$ в области $\Gamma' > 1$ уменьшается при росте Γ' быстрее, чем $\partial f / \partial \mu'$. Очевидное объяснение этого различия сразу следует из (4.3), если учесть, что взятие производных по T и μ приводит, соответственно, к нечетному и четному по ε относительно точки μ множителям под интегралом.

Резюмируя результаты расчетов с использованием спектральной плотности в форме прямоугольника, можно сказать, что они подтверждают существование оптимальных условий генерации в широком интервале концентраций легирующего элемента, возможность которых допускалась в п. 4.1 на основе качественных соображений. Более детальное рассмотрение в соответствии с постановкой задачи в п. 4.1 целесообразнее вести, рассчитав $\partial f / \partial T'$, $\partial f / \partial \mu'$ с использованием лоренцевой формы спектральной плотности.

4.3 Область значений T' , Γ' , оптимальных для генерации фононов, в случае лоренцевой формы спектральной плотности

Получение явных выражений для $\partial f / \partial \mu'$, $\partial f / \partial T'$ на основе (4.3) при лоренцевой форме (4.4) функции $A(\varepsilon, \varepsilon_{\mathbf{k}})$ затруднительно, поэтому был проведен численный расчет, результаты которого представлены на рис. 4.4, 4.5. Сравним попарно рис. 4.4 с рис. 4.2 и рис. 4.5 с рис. 4.3. Сравнение первой пары расчетов $\partial f / \partial \mu'$ показывает, что оптимальная область параметров T' , Γ' сохраняется при переходе к плавно меняющейся спектральной плотности (4.4), хотя линии 1 и 2 максимумов $\partial f / \partial \mu'$ по T' , Γ' меняются местами (на рис. 4.2 линия 2 расположена над -, а на рис. 4.4 под линией 1). Далее, значения $\partial f / \partial \mu'$ при лоренцевой форме $A(\varepsilon, \varepsilon_{\mathbf{k}})$ медленно убывают при росте Γ' и уменьшении T' в области между линиями 1 и 2, тогда как на рис. 4.2 $\partial f / \partial \mu'$ ведет себя немонотонно, особенно в окрестности точки $T' \rightarrow 0$, $\Gamma' \rightarrow 1$. Сплошная линия 3 на рис. 4.4-проекция на плоскость (Γ', T') „гребня“ на рельефе

функции $\partial f / \partial \mu'$. Зависимости $T'(\Gamma')$ для линий 1, 2, 3, подобно соотношению (4.2), описывают уменьшение T' с ростом Γ' , то есть могут служить основой для определения температуры \tilde{T}_1 .

Наиболее характерным отличием рис. 4.5 от рис. 4.3 является отсутствие „провала“ у линии 1, которая слабо изменяется при $0 < \Gamma' \leq 0,8$ вблизи значения $T' \approx 0,4$, имея минимум в точке $T' \approx 0,39$, $\Gamma' \approx 0,42$, а при $\Gamma' > 0,8$ аппроксимируется прямой

$$T' \approx 0,25 + 0,175\Gamma', \quad (4.21)$$

разумеется, возможна и параболическая аппроксимация. Очевидно, что с помощью зависимости $T'(\Gamma')$, удовлетворяющей (4.21), можно определить температуру \tilde{T}_2 , возрастающую с ростом Γ' . Линия 2 на рис. 4.5 по сравнению как с рис. 4.3, так и с рис. 4.4 смещена в область более низких значений Γ' , T' и, в принципе, могла бы использоваться для введения температуры \tilde{T}_1 при близком расположении к ней начальной температуры мартенситного превращения для основного компонента сплава.

Если принять, что зависимости $\tilde{T}_{1,2}(\Gamma')$, являющиеся отображениями на плоскость (Γ', T') зависимостей $\tilde{T}_{1,2}(C)$, известны, то для получения явных выражений $\tilde{T}_{1,2}(C)$ нужно выделить из полного затухания электронов Γ части, зависящие от температуры и концентрации легирующего элемента:

$$\Gamma(T, C) = \Gamma(T) + \Gamma(C). \quad (4.22)$$

Для парамагнитного сплава и температур больше или порядка температуры Дебая T_D затухание $\Gamma(T)$ обусловлено главным образом процессами рассеяния s-электронов на фононах и флуктуациях магнитного момента. Первый из этих процессов приводит к линейному по температуре вкладу в $\Gamma(T)$, а второй при температурах выше температуры Кюри T_c (или Нееля T_N) слабо зависит от T и быстро убывает при $T < T_c$. Измерение удельного электросопротивления ρ железа [158] (см. также §3 гл.25 в [159]) показало, что при $T > 500$ К вклад рассеяния на магнитных неоднородностях превышает вклад от фононного рассеяния, имея тот же порядок величины. В актуальной, с точки зрения протекания

мартенситного превращения, области температур $T < 1100$ К ρ монотонно убывает при уменьшении T . Хотя зависимость $\rho(T)$ и не является линейной, ниже для простоты используем линейную аппроксимацию $\hbar \Gamma(T) = a_0 k_B T$, где a_0 -безразмерный параметр. Заранее ясно, что a_0 должен равняться нескольким единицам, так как уже вклад чисто фононного рассеяния в случае переходных металлов дает $a_0 \approx 1$. В принципе, в (4.22) можно включить и не зависящий от T , C вклад, обусловленный рассеянием на статических дефектах (дислокации, примесные атомы третьего элемента), но мы будем полагать, что рост кристалла мартенсита идет в области практически свободной от таких дефектов, и ограничимся вкладами двух членов в (4.22). Использование соотношения (4.22) учитывает, что процесс рассеяния на фононах, аналогично примесному рассеянию, приводит к размытию закона сохранения энергии при столкновениях, выражающемуся в замене δ -функции лоренцевой линией с конечной шириной [160]. В связи с этим напомним, что равноправие различных механизмов рассеяния в размытии фермиевского распределения всегда отмечается при обсуждении вопроса о правомерности введения поверхности Ферми в сплавах; в частности, подчеркивается, что возможен случай, когда „... сплав вблизи абсолютного нуля температуры является лучшей моделью идеального кристалла, чем чистый металл при комнатной температуре“ [161].

Затухание $\Gamma(C)$ обусловлено примесным рассеянием s-электронов и при слабом рассеянии в модели сплава с диагональным беспорядком имеет вид [100]

$$\hbar \Gamma(C) = 2 \pi g_s(\mu) \delta^2 C(1 - C). \quad (4.23)$$

Здесь $\delta = (\varepsilon_s^{\text{л.э.}} - \varepsilon_s^M)$ - разность уровней энергии s-состояний компонентов сплава ($\varepsilon_s^{\text{л.э.}}$ - энергия s - состояния для легирующего элемента, ε_s^M - для матрицы); $g_s(\mu)$ - плотность состояний s-электронов матрицы на уровне Ферми (на одну ориентацию спина). Для численных оценок $\Gamma(C)$ необходимо знать величины $g_s(\mu)$ и δ , которые можно найти, если заданы ширина W_s s-зоны, параметр a_0 и числа s-электронов, отдаваемых атомами легирующего

элемента $Z_{\text{л.э.}}$ и матрицы Z_M в общую s-зону, то есть, если известны электронные конфигурации атомов сплава. Действительно, для параболической s-зоны имеем

$$g_s(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}, \quad \int_0^{W_s} g_s(\varepsilon) d\varepsilon = 1, \quad (4.24)$$

$$g_s(\varepsilon) = \frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{W_s^3} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Учитывая теперь, что заполненная часть s-зоны вмещает $Z_M/2$ электронов, то есть

$$\int_0^{\mu} g_s(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{Z_M}{2}, \quad (4.25)$$

получаем, подставляя (4.24) в (4.25)

$$\left(\frac{\mu}{W_s} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{Z_M}{2} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (4.26)$$

Тогда из (4.26) и (4.24) выразим $g_s(\mu)$ через Z_M :

$$g_s(\mu) = \frac{3}{2 W_s} \left(\frac{\mu}{W_s} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{3}{2 W_s} \left(\frac{Z_M}{2} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (4.27)$$

Параметр δ , согласно [100], связан с разностью $\Delta Z = Z_{\text{л.э.}} - Z_M$ соотношением

$$\Delta Z = -\frac{2}{\pi} \arctan [\pi \delta g_s(\mu) (1 - \delta I(\mu))^{-1}]; \quad (4.28)$$

$$I(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_s(\eta)}{\mu - \eta} d\eta = \frac{3}{2 W_s} \left[x \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| - 2 \right], \quad (4.29)$$

$$x = \left(\frac{Z_M}{2} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Ниже под Z_M понимается число электронов, отдаваемых в s-зону атомами железа $Z_M = Z_{Fe}$.

Ясно, что обоснование введения зависимостей $\tilde{T}_{1,2}(C)$, подобных $M_S(C)$, на основе выполненного анализа можно провести, отображая $M_S(C)$ на плоскость (Γ', T') и устанавливая, при каких значениях параметров a_0 , δ , $\varepsilon_d - \mu$ полученные отображения $M_S(\Gamma')$ оказываются в окрестности штриховых линий на рис. 4.4 и 4.5. Именно на этом пути удастся связать богатую экспериментальную информацию с выявленными выше закономерностями.

4.4 Отображение зависимостей $M_S(C)$ в область значений T' , Γ' , оптимальных для генерации фононов, и анализ электронных конфигураций атомов в бинарных сплавах замещения

Упомянутые в п. 4.1 концентрационные зависимости $M_S(C)$ относятся к данным, полученным для массивных образцов. Помимо данных для массивных образцов к настоящему времени накоплена экспериментальная информация по сверхбыстрому (до $5 \cdot 10^5$ K/c) охлаждению фольг с толщиной $\sim 10^{-4}$ м (см., например, [162–164] для бинарных сплавов железа и [165, 166] - для сталей). Показано, что в различных интервалах скоростей охлаждения в сталях и сплавах на основе железа реализуются четыре „ступени“ мартенситного превращения. Экстраполяция на чистое железо дает следующие значения температур M_S^i этих „ступеней“ (в °C): $M_S^I = 820$, $M_S^{II} = 720$, $M_S^{III} = 540$, $M_S^{IV} = 430$. Существование нескольких ступеней M_S объясняется в [164] особенностями строения движущейся межфазной границы и различием механизмов диффузии в ее окрестности. Число ступеней при изменении состава, как правило, сокращается из-за различия темпов изменения M_S^i при легировании, приводящего к пересечению ступеней. Рассмотрим подробнее системы Fe - Ni, Fe - Co, зависимости M_S^i для которых изображены на рис. 4.6 и 4.7. В сплавах Fe - Ni для наклонов за-

висимостей $M_S^i(C)$ выполняются неравенства

$$\left| \frac{d M_S^{II}}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^I}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^{III}}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^{IV}}{d C} \right|, \quad \frac{d M_S^i}{d C} < 0,$$

то есть все M_S^i уменьшаются с ростом C . В сплавах Fe - Co температуры M_S^I , M_S^{III} , M_S^{IV} возрастают при увеличении C , M_S^{II} уменьшается, причем

$$\left| \frac{d M_S^{II}}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^{III}}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^{IV}}{d C} \right| > \left| \frac{d M_S^I}{d C} \right|.$$

Если связать, согласно [164], вторую ступень МП с движением межфазной границы, содержащей атмосферы Коттрелла, то аномальное поведение M_S^{II} в случае сплавов Fe - Co может быть обусловлено примесью углерода, высокая подвижность которого обеспечивает быстрое формирование атмосфер. Заметим, что для сплавов Fe - C наклон $d M_S^{II}/d C < 0$ и по порядку величины превышает наклоны $d M_S^{II}/d C$ в сплавах Fe - Ni, Fe - Co. Это свидетельствует в пользу высказанного предположения. Поскольку описание рассеяния электронов на примеси внедрения связано с учетом эффектов деформации решетки, мы не будем рассматривать зависимость $M_S^{II}(C)$.

Необходимо отметить еще одну особенность зависимости $M_S^I(C)$ в сплавах Fe - Co: в области малых концентраций M_S^I остается практически постоянной, то есть $d M_S^I/d C \approx 0$, а при $C \geq 7\%$ появляется выраженный наклон $d M_S^I/d C > 0$. Если считать зависимость $\tilde{M}_S^I(\Gamma')$ подобной зависимости $\tilde{T}_2(\Gamma')$, эту особенность легко объяснить, полагая, что на плоскости (Γ', T') температуре $M_S^I(0)$ для чистого железа отвечают координаты $T' \approx 0,4$, $\Gamma' \approx 0,42$, вблизи которых, как отмечалось в п. 4.3, лежит минимум кривой \tilde{T}' и происходит переход от \tilde{T}' , практически не зависящей от $\tilde{\Gamma}'$, к зависимости (4.21). Тогда, выбирая данную точку за начальную, согласно формуле (4.16), имеем

$$T' = \frac{k_B M_S^I(0)}{\varepsilon_d - \mu} \approx 0,4; \quad \Gamma' = \frac{\alpha_0 k_B M_S^I(0)}{2 (\varepsilon_d - \mu)} \approx 0,42, \quad (4.30)$$

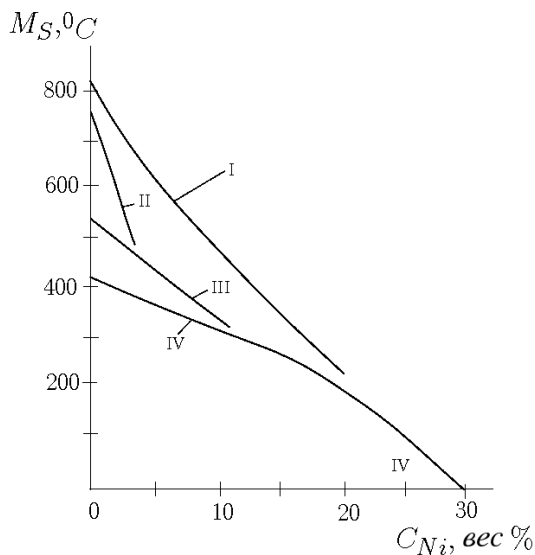


Рис. 4.6. Зависимость температур \tilde{M}_S^i в сплавах железо-никель от содержания никеля [162]

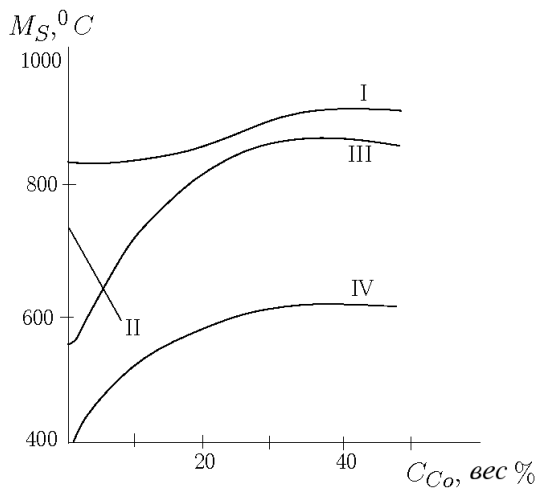


Рис. 4.7. Зависимость температур \tilde{M}_S^i в сплавах железо-кобальт от содержания кобальта [164]

откуда сразу находим значения двух параметров: $a_0 \approx 2,1$ и $(\varepsilon_d - \mu)/k_B \approx 2,5$ $M_S^I \approx 2750$ К. Фиксируя эти параметры, как характерные для ГЦК фазы железа, отображение M_S^i на плоскость (Γ', T') можно вести, варьируя только параметр ΔZ , задаваемый формулой (4.28). Следует учитывать, что связанный с ΔZ параметр δ в случае слабого рассеяния должен быть мал по сравнению с шириной s-зоны W_s . Примем $W_s = 10$ эВ, что при ширине d-зоны $W_d = 5$ эВ отвечает различию средних плотностей состояний s- и d-электронов в десять раз.

Для системы Fe-Ni в качестве реперных используем две атомные конфигурации никеля $3d^{9,4}4s^{0,6}$ и $3d^{8,6}4s^{1,4}$, предложенные в [110, 167]. При отображении зависимостей $M_S^i(C)$ на плоскость (Γ', T') выбирались пять точек кривых $M_S^i(C)$, взятых из работы [162], для $C_1 = 0$ (начальные точки), $C_2 = 5\%$, $C_3 = 12\%$ (вблизи C_3 пересекаются кривые $M_S^{III}(C)$ и $M_S^{IV}(C)$), $C_4 = 22\%$ (вблизи C_4 изменяется наклон кривой $M_S^{IV}(C)$), $C_5 = 30\%$ (вблизи C_5 пересекаются кривые $M_S^I(C)$ и $M_S^{IV}(C)$). Замечая далее, что при концентрации никеля $C_{Ni} > C_5$ наклон зависимости $M_S(C)$ резко увеличивается, так что изменение концентрации никеля на 4% от 30% до 34% уменьшает M_S от температур 250-270 К до 0 К, в качестве дополнительного условия потребуем попадания точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ пересечения первой и четвертой ступеней на линию экстремумов 2 (см. рис. 4.4), конец которой вблизи $\Gamma' \approx 1$ имеет участок быстрого нелинейного спада значений T' при малом изменении Γ' . Для указанных выше значений параметров a_0 , W_s , $Z_{Ni} = 0,6$ и $\Delta Z > 0$ с помощью соотношений (4.16), (4.22), (4.23), (4.27) - (4.29) путем варьирования ΔZ нетрудно показать, что условие попадания точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ на линию 2 выполняется при $Z_{Fe} = 0,91$. Уровень значений $\partial f / \partial \mu' \geq 0,16$ в точке $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ остается высоким. Для сравнения укажем, что при $Z_{Fe} = 1,02$ (точка $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ на линии 1) $\partial f / \partial \mu' \approx 0,13$ заметно ниже. Рис. 4.8 иллюстрирует зависимость $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ для $Z_{Fe} = 0,91$, то есть для конфигурации $3d^{7,09}4s^{0,91}$ атомов железа. Уровень $\partial f / \partial \mu' \approx 0,16$ сохраняется при отклонениях точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ от линии 2, сопровождающихся изменением Z в интервале $0,88 \leq Z \leq 0,93$.

При $\Delta Z < 0$ атомам железа будут отвечать конфигурации с числом s-электронов меньше 0,6. Хотя такая конфигурация, по-видимому, не реализуется, рассмотрение случая $\Delta Z < 0$ полезно в методическом отношении. Действительно, из анализа (4.23), (4.27)-(4.29) следует, что в используемой модели часть затухания $\Gamma(C)$, обусловленная рассеянием на заряженной примеси, обращается в нуль в трех случаях: при $\Delta Z = 0$ (примесь нейтральна), при $Z_M \rightarrow 0$, $x \rightarrow 0$, $g_s(\mu) \rightarrow 0$ (с уровнем Ферми совпадает дно s-зоны с нулевым значением плотности состояний) и при $Z_M \rightarrow 2$, $x \rightarrow 1$ (с уровнем Ферми совпадает потолок полностью заполненной s-зоны). Полное затухание в этих случаях, согласно

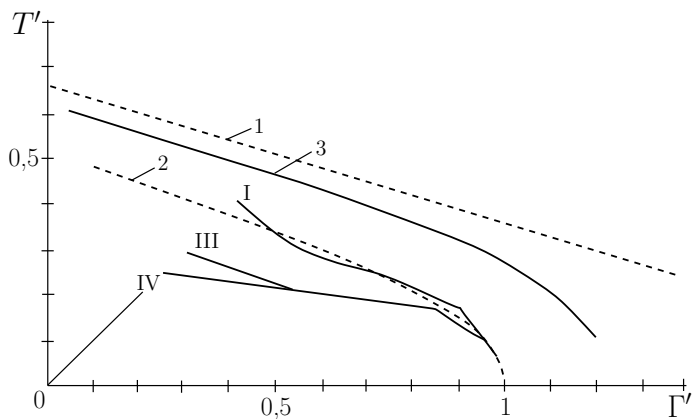


Рис. 4.8. Зависимости $\tilde{M}_S^I(\Gamma')$ для сплавов Fe-Ni при $Z_{Ni} = 0,6$, $Z_{Fe} = 0,91$ (либо при $Z_{Ni} = 1,4$, $Z_{Fe} = 1,04$): кривые \tilde{M}_S^I проведены из начальных точек (I, III, IV), соответствующих чистому железу; линии 1, 2 и 3 те же, что и на рис. 4.4

(4.22), (4.30), связано с рассеянием на фононах и магнитных неоднородностях и $\Gamma' = 1,05 T'$; точка $\tilde{M}_S^I(C_5) = \tilde{M}_S^{IV}(C_5)$ имеет координаты $T' \approx 0,1$, $\Gamma' \approx 0,1$ вне области оптимальных значений, $\partial f / \partial \mu' \approx 0,04$ и в четыре раза меньше соответствующих значений в окрестности линии 2 (см. рис. 4.8). При фиксированном T' приближение к области оптимальных значений связано с увеличением Γ' за счет примесного рассеяния. Почти тому же, что и на

рис. 4.8 ходу кривых $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ отвечает $Z_{Fe} \approx 0,09$ и конфигурация $3d^{7,91}4s^{0,09}$ атома железа, близкая $3d^84s^0$. Полное совпадение хода кривых, однако, невозможно, поскольку при $\Delta Z < 0$ значения Γ' ограничены. Существование максимума Γ' при фиксированном T' для некоторого Z_{Fe} , лежащего внутри интервала $0 < Z_{Fe} < 0,6$, очевидно, так как на границах интервала ($Z_{Fe} = 0,6$ ($\Delta Z = 0$), $Z_{Fe} = 0$) затухание Γ' принимает минимальные совпадающие значения $\Gamma' \approx T'$. Условию $\Gamma' = \Gamma'_{\max} \approx 0,936$ при $T' = 0,1$ и отвечают указанные выше $Z_{Fe} \approx 0,09$ и конфигурация атома железа $3d^{7,91}4s^{0,09}$. Как видно из рис. 4.8, в точке с координатами $T' = 0,1$, $\Gamma' \approx 0,936$ значение $\partial f / \partial \mu' \geq 0,16$, но линия 2 для точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ недостижима.

При $Z_{Ni} = 1,4$ и $\Delta Z < 0$ положению точки $\tilde{M}_S(C_5)$ на линии 2 с координатами $T' = 0,1$, $\Gamma' \approx 0,96$ (теми же, что и в случае $Z_{Ni} = 0,6$, $\Delta Z > 0$) отвечают $Z_{Fe} \approx 1,04$ и конфигурация $3d^{6,96}4s^{1,04}$ атомов железа. Для разности $\Delta Z > 0$, отвечающей неравенствам $1,4 < Z_{Fe} < 2$, проводя рассуждения, аналогичные случаю $Z_{Ni} = 0,6$, $\Delta Z < 0$ находим конфигурацию атомов железа $3d^{6,11}4s^{1,89}$, близкую $3d^64s^2$, при которой точка $\tilde{M}_S(C_5)$ имеет координаты $T' \approx 0,1$, $\Gamma' = \Gamma'_{\max} \approx 0,65$. Хотя эта точка и не достигает линии 2, значения $\partial f / \partial \mu' \geq 0,15$ в ней достаточно велики. Таким образом, предположение о сосуществовании в γ -фазе двух конфигураций железа, близких $3d^74s^1$ и $3d^64s^2$ (см. п. 2.5), при $Z_{Ni} = 1,4$ совместимо с требованием сохранения оптимальных условий генерации в сплавах Fe - Ni для обеих конфигураций.

Обработка данных [163] для системы Fe - Mn проводилась аналогично. В качестве реперных брались конфигурации атомов железа, найденные выше для системы Fe - Ni, и накладывалось требование совпадения точек \tilde{M}_S^{IV} систем Fe - Ni, Fe - Mn при $C_{Ni} = 22\%$ и $C_{Mn} = 11\%$, соответственно. Результаты приведены в табл. 4.1.

Для удобства при сравнении, данные о величинах Z , ΔZ системы Fe - Ni приведены в табл. 4.2. Из таблиц видно, что при „средних“ конфигурациях железа, близких $3d^74s^1$ (это эквивалентно $Z_{Fe} = 1$) для достижения в сплавах Fe - Mn темпа снижения зависимости $M_S(C)$, в два раза превышающего темп снижения в спла-

Таблица 4.1. Зарядовые числа ионов марганца и железа

Z_{Fe}	0,09	0,91		1,04		1,89
Z_{Mn}	0,84	0,53	1,37	1,49	0,63	1,19
ΔZ_{Fe-Mn}	- 0,75	0,38	- 0,46	- 0,45	0,41	0,7

вах Fe-Ni, достаточно, чтобы атомы марганца отдавали в s-зону на 0,1 электрона больше, чем атомы Ni. Для „крайних“ конфигураций, близких $3d^8 4s^0$, $3d^6 4s^2$, различие составляет 0,2 электрона на атом.

Таблица 4.2. Зарядовые числа ионов никеля и железа

Z_{Ni}	0,6		1,4	
Z_{Fe}	0,09	0,91	1,04	1,89
ΔZ_{Fe-Ni}	- 0,51	0,31	- 0,36	0,49

Используем теперь найденные конфигурации атомов железа при построении кривых $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ для сплавов Fe - Co. Варьируя параметр ΔZ , нетрудно получить линии $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$, приближающиеся к линии 1 на рис. 4.5, для зависимости $\tilde{T}'(\Gamma')$. На рис. 4.4 представлены кривые $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ для „средней“ конфигурации атомов железа $3d^{7,09} 4s^{0,91}$ и значения $\Delta Z = 0,2$, отвечающего совпадению хода кривой $\tilde{M}_S^I(\Gamma')$ с линией 1 (штриховая линия на рис. 4.4). Концы линий \tilde{M}_S^i соответствуют концентрации 40% Co, при которой M_S^I , M_S^{III} достигают максимальных значений (см. рис. 4.7).

Тот же, что и для $\Delta Z = 0,2$, ход кривых получается и при $\Delta Z = -0,21$, то есть для конфигурации $3d^{7,88} 4s^{1,12}$ атома кобальта. Данные для остальных конфигураций приведены в табл. 4.3.

Таблица 4.3. Зарядовые числа ионов кобальта и железа

Z_{Fe}	0,09	0,91		1,04		1,89
Z_{Co}	0,29	0,71	1,12	0,83	1,24	1,6
ΔZ_{Fe-Co}	- 0,2	0,2	- 0,21	0,21	- 0,2	0,29

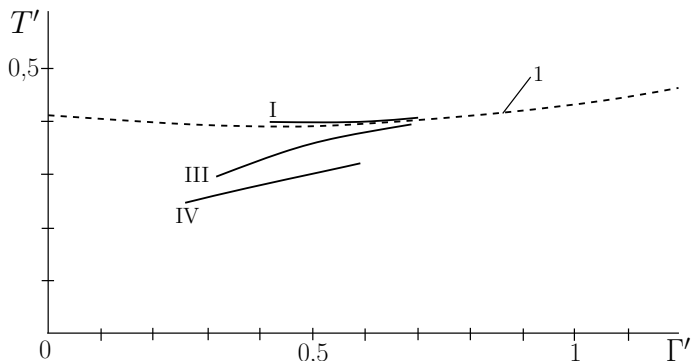


Рис. 4.9. Зависимости $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ для сплавов Fe-Co при $Z_{Fe} = 0,91$, $Z_{Co} = 1,12$ (либо $Z_{Fe} = 1,04$, $Z_{Co} = 1,24$); линия 1 та же, что и на рис. 4.5

Сопоставление с рис. 4.4 показывает, что координаты концов линий \tilde{M}_S^I , \tilde{M}_S^{III} приблизительно равные $T' \approx 0,4$, $\Gamma' \approx 0,7$, отвечают точке на линии 3, а координаты конца линии \tilde{M}_S^{IV} - точке на линии 2 со значением $\partial f / \partial \mu' \approx 0,18$. В связи с этим снижение \tilde{M}_S^I , \tilde{M}_S^{III} при $C_{Co} > 40\%$ можно объяснить началом перемещения изображающих точек \tilde{M}_S^I , \tilde{M}_S^{III} по линии 3, обеспечивающего медленное снижение $\partial f / \partial \mu'$. В то же время изображающая точка \tilde{M}_S^{IV} при $C_{Co} > 40\%$ может смещаться по линии постоянного уровня $\partial f / \partial \mu' \approx 0,18$ с медленным увеличением \tilde{M}_S^{IV} . Очевидно, что подобная трактовка предполагает приблизительное „равноправие“ двух источников неравновесности при мартенситном $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах Fe-Co, тогда как в сплавах Fe - Ni, Fe - Mn основным источником неравновесности является градиент химического потенциала $\nabla \mu$.

4.5 Обсуждение результатов для сплавов замещения

Проведенное рассмотрение показывает, что можно получить удовлетворительное соответствие между экспериментальными $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ и теоретическими $\tilde{T}_{1,2}'(\Gamma')$ зависимостями при разумных электрон-

ных конфигурациях компонентов сплава, если в качестве спектральной плотности $A(\varepsilon, \varepsilon_{\mathbf{k}})$, учитывающей полное затухание s-электронов, выбирается функция Лоренца.

Полезно обсудить, в какой мере использованные при построении отображений M_S^i параметры согласуются с другими экспериментальными данными и насколько чувствительны оценки величин ΔZ в модели сплава с диагональным беспорядком к изменениям параметров.

4.5.1 Выбор значения a_0 и электронных конфигураций атомов на основе данных о электрических и оптических свойствах компонентов сплава

Начнем с параметра a_0 . Используя линейную экстраполяцию для зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ в интервале температур $0 < T < 1100$ К из [158] находим средний наклон кривой $\rho(T)$: $\Delta\rho/\Delta T \approx 10^{-9}$ Ом · м/К. Если теперь применить формулу Друде (см., например, [87, 168])

$$\frac{1}{\rho} = \frac{e^2 n}{m^* \tau^{-1}} \equiv \frac{\hbar e^2 n}{m^* \Gamma} = \frac{\hbar e^2 n}{m^* a_0 k_B T}, \quad (4.31)$$

то для a_0 получим

$$a_0 = \frac{e^2 n \hbar}{m^* k_B} \frac{\Delta\rho}{\Delta T}, \quad (4.32)$$

где e , m^* - заряд и эффективная масса электрона, n - концентрация электронов. Полагая, что каждый атом железа отдает по одному электрону в s-зону ($Z_{Fe} = 1$), получаем концентрацию s-электронов $n_s \approx 8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Тогда при m^* равной массе свободного электрона $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг из (4.32) находим $a_0 \approx 17,2$, что в 8 раз больше использованного выше значения $a_0 = 2,1$. При $a_0 \approx 17$ затухание Γ в точке $M_S^I \approx 1100$ К равнялось бы 1,6 эВ (время жизни s-электрона $\tau \approx 4 \cdot 10^{-16}$ с), точка \tilde{M}_S^i на плоскости (Γ', T') в случае $\varepsilon_d - \mu \approx 0,24$ эВ имела бы координаты $T' \approx 0,4$, $\Gamma' \approx 3,3$, а уровень значений $\partial f / \partial \mu'$ снизился бы до 0,08. Заметим, что при $\Gamma' \approx 1,6$ эВ отображение точки M_S^I в окрестность точки $(T' \approx 0,1$,

$\Gamma' \approx 1$) с восстановлением значений $\partial f / \partial \mu' \approx 0,15 \div 0,16$ возможно для $\varepsilon_d - \mu \approx 0,8$ эВ, найденного в [121] в случае немагнитного состояния железа с ГЦК решеткой.

Хотя значения $\tau \sim 10^{-16}$ с использовались при интерпретации термоэлектрического эффекта [169] в никеле, величина τ скорее всего занижена, а Γ , a_0 - завышены из-за того, что формула Друде (4.31), справедливая в случае газа свободных электронов, не отражает существующую в переходных металлах гибридизацию s- и d- зон. Действительно, как показывают расчеты [111], плотность s-состояний g_s подобна плотности состояний свободных электронов лишь у дна s-зоны, в области же перекрытия s- и d-зон g_s не обнаруживает монотонного возрастания с ростом энергии ε , имея вблизи уровня Ферми μ значения $g_s(\mu)$ порядка 10^{-2} 1/(эВ·атом). Поэтому при интерпретации результатов измерения $\rho(T)$ следует использовать более общую формулу, связывающую ρ с $g_s(\mu)$:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{2}{3} e^2 v^2 \tau g_s(\mu) = \frac{2}{3} \frac{\hbar e^2 v^2 g_s(\mu)}{a_0 k_B T}, \quad (4.33)$$

где v^2 - среднее значение квадрата скорости s-электронов на поверхности Ферми [168], а величина $g_s(\mu)$ дает число состояний с одной проекцией спина в единичном интервале энергий в единице объема. При концентрации атомов $8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ имеем соответствие единиц измерения

$$\frac{1}{\text{эВ} \cdot \text{атом}} = 5 \cdot 10^{47} \frac{1}{\text{Дж} \cdot \text{м}^3}. \quad (4.34)$$

Полагая $v \sim 10^6$ м/с, $\Delta\rho/\Delta T \approx 10^{-9}$ Ом·м/К, из (4.33), (4.34) находим, что значению $a_0 = 2,1$ отвечает $g_s(\mu) \approx 2,3 \cdot 10^{-2}$ 1/(эВ·атом), примерно в пять раз меньшая $g_s(\mu)$, оцениваемой с помощью (4.27) при $Z_{Fe} = 1$.

Несомненный интерес представляют результаты оптических измерений [170] в дальней инфракрасной области спектра (длина волны света 10,6 мкм), позволившие оценить значения плазменных Ω и релаксационных τ^{-1} частот для „чистых“ s- и гибридизированных s-d - типов носителей заряда в расплавах железа, никеля и их

растворах с хромом при $T = 1873$ К:

$$\left. \begin{aligned} \Omega_s^2 &= 15 \cdot 10^{30} \text{ с}^{-2}, & \Omega_{s-d}^2 &\approx 33 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-2}, \\ \tau_s^{-1} &= 2,4 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}, & \tau_{s-d}^{-1} &\approx 4 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}, \end{aligned} \right\} Fe$$

$$\left. \begin{aligned} \Omega_s^2 &\approx 29 \cdot 10^{30} \text{ с}^{-2}, & \Omega_{s-d}^2 &\approx 40 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-2}, \\ \tau_s^{-1} &= 2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}, & \tau_{s-d}^{-1} &\approx 3 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}. \end{aligned} \right\} Ni$$
(4.35)

Обращает внимание, во-первых, достаточно хорошее соответствие между данными (4.35) и [158] для удельного сопротивления ρ . Например, согласно [158], в железе при $T \approx 1900$ К, $\rho \approx 1,4 \cdot 10^{-6}$ Ом м, а оценка с помощью данных (4.35) дает

$$\rho_{s-d} = \frac{\tau_{s-d}^{-1}}{\varepsilon_0 \Omega_{s-d}^2} \approx 1,35 \cdot 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{м},$$

$$\rho_s = \frac{\tau_s^{-1}}{\varepsilon_0 \Omega_s^2} \approx 1,8 \cdot 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{м},$$

где $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м - электрическая постоянная. Во-вторых, отношения квадратов плазменных частот

$$\frac{\Omega_{sNi}^2}{\Omega_{sFe}^2} \approx 1,93, \quad \frac{\Omega_{s-dNi}^2}{\Omega_{s-dFe}^2} \approx 1,21,$$

пропорциональные отношениям концентраций электронов в никеле и железе, оказываются больше единицы, что в предположении близости эффективных масс $m_{Ni}^* \sim m_{Fe}^*$ электронов согласуется с выбором конфигураций $3d^{8,6}4s^{1,4}$, $3d^74s^1$ для никеля и железа, соответственно. В-третьих, расчет n_s - концентрации s-электронов, входящей в формулу для плазменной частоты

$$\Omega_s^2 = \frac{e^2 n_s}{m_s \varepsilon_0},$$
(4.36)

при $m_s \approx m_0$ дает n_s в шестнадцать раз меньшую значения $8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, отвечающего $Z_{Fe} = 1$, то есть средняя (по интервалу энергий заполненных состояний s-зоны) плотность s-состояний \bar{g}_s на

порядок меньше \bar{g}_s для свободных электронов. Это прямо указывает на существование коллективизированных s-электронов атомов железа преимущественно в гибридизированных s-d состояниях. Сохраняя условие $Z_{Fe} = 1$ и применяя формулу (4.36) к Ω_{s-d}^2 с заменой $n_s \rightarrow n_{s-d} \approx 7 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, находим эффективную массу $m_{s-d} \approx 6,7m_0$. В-четвертых, учитывая, что при изменении T от 1900 К до 1100 К удельное сопротивление ρ железа, согласно [158], уменьшается примерно на $20 \div 21\%$, для релаксационных частот в случае железа вместо значений (4.35) при T = 1100 К получим

$$\tau_s^{-1} \approx 1,9 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}, \quad \tau_{s-d}^{-1} \approx 3,2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}. \quad (4.37)$$

Отсюда легко оцениваем a_0 :

$$a_{0s} = \frac{\hbar \tau_s^{-1}}{k_B T} \approx 1,3, \quad a_{0s-d} = \frac{\hbar \tau_{s-d}^{-1}}{k_B T} \approx 2,2. \quad (4.38)$$

Таким образом, на основе сравнения результатов, полученных при интерпретации концентрационной зависимости $M_S(C)$, с данными оптических измерений, можно сделать следующие выводы.

1. Использованное выше значение $a_0 \approx 2,1$ соответствует размытому распределению гибридизированных s-d носителей.
2. Из двух реперных конфигураций никеля предпочтение следует отдать конфигурации $3d^{8,6}4s^{1,4}$, а из возможных конфигураций железа - конфигурации близкой $3d^7 4s^1$.
3. Значение параметра $\varepsilon_d - \mu \approx 0,24 \text{ эВ}$ связано со спин-поляризованным состоянием атомов железа, то есть $\varepsilon_d - \mu = \varepsilon_{d\uparrow} - \mu$ (см. п. 2.5).
4. Промежуточное по отношению к никелю и железу положение кобальта в периодической таблице элементов позволяет предположить, что из двух „средних“ конфигураций его атомов с $\Delta Z \approx \pm 0,2$ (см. табл. 4.3), приводящих к разумной трактовке зависимости $M_S(C)$ в сплавах Fe-Co, следует выбрать конфигурацию, близкую $3d^{7,8}4s^{1,2}$, то есть с $\Delta Z \approx -0,2$. В

соответствии с приведенной ранее интерпретацией отношений плазменных частот s-носителей можно ожидать выполнения неравенств: $\Omega_{sFe}^2 < \Omega_{sCo}^2 < \Omega_{sNi}^2$, $\Omega_{s-d,Fe}^2 < \Omega_{s-d,Co}^2 < \Omega_{s-d,Ni}^2$. Следует, однако, иметь в виду, что разделение частот $\Omega_{1,2}$ и $\tau_{1,2}^{-1}$ для двух групп носителей в случае, когда частота света $\omega < \tau_1^{-1}$, τ_2^{-1} и τ_1^{-1} , τ_2^{-1} имеют одинаковый порядок величины (как в случае τ_s^{-1} и τ_{s-d}^{-1}), не является тривиальной задачей [171]. Так, например, найденные в [172] при $T = 295$ К эффективные значения $\Omega_{ef}^2 = (32 \pm 1, 2)10^{30} \text{ с}^{-2}$ и $\tau_{ef}^{-1} = (0, 8 \pm 0, 04)10^{14} \text{ с}^{-1}$ для ОЦК - фазы железа в предположении друдевского характера поглощения света прекрасно согласуются с результатами (4.35) из [170] для Ω_{s-d}^2 и τ_{s-d}^{-1} , если учесть, что плазменная частота слабо зависит от температуры, а частота релаксации снижается при уменьшении T (при $a_0 = 2, 1$ и $T = 295$ К имеем $\tau^{-1} = a_0 k_B T \hbar^{-1} = 0, 81 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$). Информация же о частотах s-подсистемы осталась скрытой. Не исключено в связи с этим, что найденные для кобальта значения $\Omega^2 = 31 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-2}$, $\tau^{-1} = 0, 37 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ (см. [171, 173]) относятся к гибридизированным s-d-электронам.

5. Удовлетворительное согласие выводов, полученных в модели сплава с диагональным беспорядком для параболической зоны s-электронов, указывает, по видимому, на то, что в этой модели верно отражается значение плотности состояний $g_s(\mu) \approx 0, 12 \text{ 1/(\varepsilon В} \cdot \text{атом)}$ для гибридизированных s-d - электронов вблизи уровня Ферми γ -фазы железа.

Среди работ, относящихся к измерению удельного электрического сопротивления сплавов Fe - Ni, отметим [174], где установлены скачки ρ в области температур M_S и A_S для $\gamma - \alpha$ прямого и обратного $\alpha - \gamma$ превращений ($\rho_\alpha < \rho_\gamma$) и [175, 176], в первой из которых исследовался сплав с 30% Ni и были обнаружены лишь слабые изменения оптических характеристик после $\gamma - \alpha$ превращения, а во второй основное внимание уделялось измерению $\rho(T)$ в окрестности магнитных фазовых переходов. Данные о поведении $\rho(T)$ в сплавах Fe - Mn имеются

в [156], а для систем Fe - C в [177–179]. Однако для детального обсуждения этих результатов, на наш взгляд, необходимо иметь данные об Ω и τ^{-1} , полученные из оптических измерений в окрестности температур M_S для серии сплавов, подобно данным для ρ в [174]. Поэтому ограничимся лишь двумя замечаниями качественного характера.

1. Значения $\rho(M_S)$ для различных сплавов, имеющих одинаковую температуру M_S , оказываются приблизительно равными, что согласуется с использовавшимся требованием совпадения затуханий Γ' для сплавов Fe- Mn и Fe- Ni с равными значениями M_S .
2. В сплавах Fe -Ni, Fe - Mn $\rho(M_S)$ медленно уменьшается при уменьшении M_S , то есть при росте концентраций марганца и никеля, что на первый взгляд противоречит предполагавшемуся выше росту затухания s-электронов Γ при снижении M_S . Следует, однако, иметь в виду, что увеличение Γ при наличии механизмов d-s, s-d рассеяния увеличивает вклад в проводимость d-электронов, и полное сопротивление может уменьшаться. В данном случае увеличение Γ дает тот же эффект, что и рост частоты квантов света, приводящий к возрастанию вклада d-электронов в световую проводимость [172].

4.5.2 Влияние изменения параметра решетки и ширины s-зоны на разность зарядовых чисел ΔZ компонентов сплава

На основании зонных расчетов (см., например, [106]) следует ожидать не только заметного отклонения m^* от m_0 , но и анизотропии величин m^* , $g_s(\mu)$, обусловленной в значительной степени s-d гибридизацией электронных состояний. Изменяя значение W_s в формуле (4.27) для изотропной функции $g_s(\mu)$, нетрудно оценить, какие электронные конфигурации будут приводить к тем же, что и ранее, оптимальным зависимостям $\tilde{M}_S^i(\Gamma')$ при новых значениях

W_s . Согласно картине зонного спектра железа [106], к значению $W_s \approx 10$ эВ, использованному выше, близки „ширины“ s -зоны в направлениях Δ и Λ первой зоны Бриллюэна, тогда как „ширина“ s -зоны в Σ - направлении $W_s \approx 15$ эВ. Расчет показывает, что, например, для $Z_{Ni} = 0,6$, переход от $W_s \approx 10$ эВ к $W_s = 15$ эВ сопровождается переходом от набора конфигураций $3d^{7,14}4s^{0,9}$, $3d^{8,3}4s^{0,7}$, $3d^{9,4}4s^{0,6}$, соответственно для железа, кобальта и никеля, к набору $3d^{7,14}4s^{0,86}$, $3d^{8,32}4s^{0,68}$, $3d^{9,4}4s^{0,6}$, то есть изменение величины ΔZ не превышает 0,04. Разумеется, погрешность ΔZ для найденных электронных конфигураций может составлять и большую чем 0,04 величину, так что переоценивать их точность в количественном отношении не следует. Отметим, в частности, что формула (4.28), устанавливающая связь ΔZ с параметром δ (правило сумм Фриделя [100]), справедлива, строго говоря, в пределе малых концентраций легирующего элемента. Значит, наиболее верным является описание начального хода кривых $M_S(C)$ при малых значениях C . Однако, когда в достаточно широком диапазоне концентраций зависимость $M_S(C)$ не сильно отличается от линейной, более широкое применение результатов, полученных с помощью (4.28), оправдано. Для концентрированных сплавов $C = 0,2 \div 0,4$ результаты безусловно носят качественный характер. Отметим также, что параметр $|\delta| W_s^{-1}$, значение которого должно быть малым по сравнению с единицей (условие применимости формулы (4.23)), не превышал при $W_s = 10 \div 15$ эВ значений $0,23 \div 0,15$, за исключением случая $Z_{Fe} = 0,09$, $Z_{Mn} = 0,84$, $|\delta| W_s^{-1} = 0,28 \div 0,18$ для „крайней“ наименее вероятной конфигурации атома железа $3d^{7,91}4s^{0,09}$ в сплаве Fe-Mn.

Обсудим теперь насколько чувствительны результаты расчета к изменению Δa параметра решетки a сплава, зависящего от температуры и состава сплава. Равномерное распределение примесей, как известно [180], приводит, во-первых, к однородному изменению параметра решетки „среднего“ кристалла и зависимости $a(C)$ от концентрации примеси и, во-вторых, к неоднородным локальным статическим смещениям вблизи атома примеси. Локальное изменение объема вблизи примеси требует внесения поправки в величину

ΔZ (4.28), сводящейся для изотропного случая, согласно [138], к замене ΔZ на

$$\Delta Z' = \Delta Z - Z_{Fe} \frac{\Delta V}{a^3} = \Delta Z - Z_{Fe} \frac{1 + \sigma_{Fe}}{1 - \sigma_{Fe}} \frac{1}{a} \frac{da}{dC}, \quad (4.39)$$

где $\sigma_{Fe} \approx 0,3$ - коэффициент Пуассона. Поправка (4.39) отражает тот факт, что экранируемый заряд атома примеси должен быть исправлен с учетом избыточного (по отношению к атому матрицы) объема ΔV , занятого примесью. Например, в сплавах Fe - Mn, согласно [156], параметр $a(C) = 3,575 - 0,072 C_{Mn}$ (в ангстремах), где C_{Mn} - концентрация марганца. Полагая $Z_{Fe} = 1$, для второго слагаемого в (4.39) получаем:

$$Z_{Fe} \frac{1 + \sigma_{Fe}}{1 - \sigma_{Fe}} \frac{1}{a} \frac{da}{dC} \approx 0,037. \quad (4.40)$$

Согласно данным [181, 182], зависимость a от C_{Ni} в сплавах Fe - Ni практически отсутствует в интервалах температур выше 575 К и концентраций $C_{Ni} < 0,3$, представляющих интерес для сравнения $M_S(C)$ сплавов Fe - Ni, Fe - Mn (см. рис. 4.10). Тогда, пренебрегая поправкой к ΔZ для сплавов Fe - Ni, видим, что найденное при сравнении данных таблиц 4.1, 4.2 в п. 4.4 различие $Z_{Mn} - Z_{Ni} \approx 0,1$ в случае „средних“ конфигураций атомов железа и $\Delta Z < 0$ почти на сорок процентов связано с поправкой (4.40) для сплава Fe - Mn, то есть число реально отдаваемых атомом марганца в s-зону электронов может быть меньше и $Z_{Mn} - Z_{Ni} \approx 0,06$.

Перейдем к оценке изменения $\Delta(\varepsilon_d - \mu)$ параметра $(\varepsilon_d - \mu)$, обусловленного однородным изменением a , используя приближение сильной связи. Прежде всего заметим, что уменьшение a должно сопровождаться увеличением вероятности межузельных переходов d-электронов и увеличением W_d - ширины d-зоны; наоборот, при росте a W_d должна уменьшаться. Полагая далее, что отношение $|\varepsilon_d - \mu| W_d^{-1}$ остается постоянным при изменении $a \rightarrow a' = a + \Delta a$, то есть $|\varepsilon_d - \mu| W_d^{-1} = |\varepsilon'_d - \mu| (W'_d)^{-1}$, имеем

$$\Delta(\varepsilon_d - \mu) = |\varepsilon_d - \mu| W_d^{-1} \Delta W_d. \quad (4.41)$$

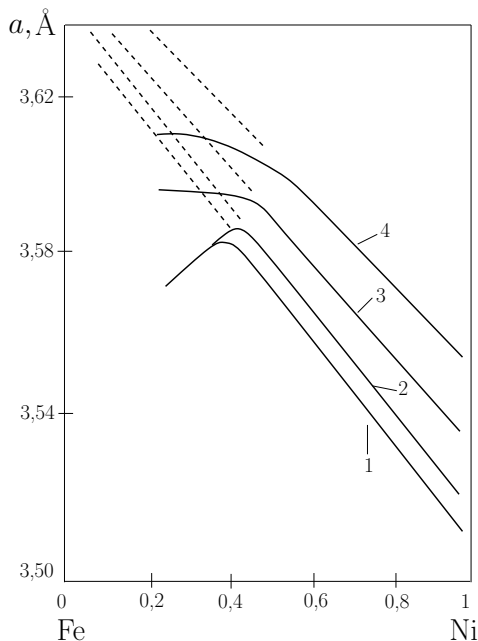


Рис. 4.10. Зависимость постоянной решетки железо-никелевых сплавов для нескольких значений температуры [181, 182]: 1 = 0 K, 2 = 288 K, 3 = 575 K, 4 = 875 K

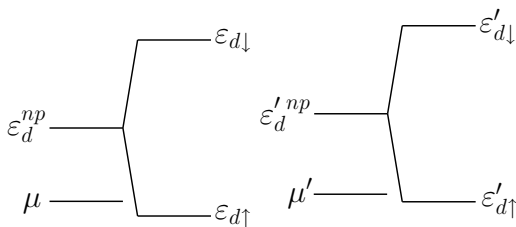


Рис. 4.11. Схема, иллюстрирующая различие знаков приращений $\Delta(\varepsilon_d^{np} - \mu) \sim \Delta W_d > 0$ и $\Delta(\varepsilon_{d\uparrow} - \mu) < 0$ при увеличении ширины d-зоны ($W'_d > W_d$) в случае $\varepsilon_{d\uparrow} < \mu$

Необходимо иметь в виду, что соответствие знаков приращений ΔW_d , $\Delta(\varepsilon_d - \mu)$ в (4.41) имеет место независимо от знака $\varepsilon_d - \mu$, если энергия ε_d относится к неполяризованному (в магнитном отношении) состоянию электронов $\varepsilon_d = \varepsilon_d^{np}$. Однако при наличии поляри-

зации для уровня энергии $\varepsilon_d = \varepsilon_{d\uparrow}$, характеризующего нижний из возникших при расщеплении ε_d^{np} уровней $\varepsilon_{d\uparrow}$, $\varepsilon_{d\downarrow}$, знаки $\Delta(\varepsilon_d - \mu)$ и ΔW_d будут совпадать только при $\varepsilon_{d\uparrow} > \mu$; если же $\varepsilon_{d\uparrow} < \mu$, знаки будут противоположны (см. рис. 4.11). Для этого случая соотношение (4.41) необходимо видоизменить

$$\Delta(\varepsilon_{d\uparrow} - \mu) = -|\varepsilon_d^{np} - \mu| W_d^{-1} \Delta W_d, \quad \varepsilon_{d\uparrow} < \mu. \quad (4.42)$$

Как обсуждалось выше в п. 2.5, в γ -фазе железа возможна реализация и неполяризованного состояния с $\varepsilon_d > \mu$ и спин-поляризованного с $\varepsilon_{d\uparrow} < \mu$. Однако, если в первом случае, применяя формулу (4.41), необходимо считать $\varepsilon_d - \mu$ одинаковыми в левой и правой частях (4.41), то во втором случае в формуле $\varepsilon_{d\uparrow} - \mu$ может существенно отличаться от $|\varepsilon_d^{np} - \mu|$; $|\varepsilon_d^{np} - \mu|$, в свою очередь, может отличаться от $|\varepsilon_d - \mu|$ в (4.41). Полагая далее $\varepsilon_d - \mu = \mu - \varepsilon_{d\uparrow} \approx 2,5 k_B M_S^I(0)$, или 2750 К (см. (4.30)) по температурной шкале, или 0,237 эВ по шкале энергий, а величину $|\varepsilon_d^{np} - \mu| \approx 0,78$ эВ, согласно расчету [122], из сравнения (4.42) и (4.41) видим, что значение $\Delta(\varepsilon_{d\uparrow} - \mu)$ будет противоположно по знаку с $\Delta(\varepsilon_d - \mu)$, превосходя его по величине примерно в 3,3 раза. Величину W_d и ее приращение ΔW_d нетрудно оценить, используя найденное в [183] выражение

$$W_d = \frac{6,83 \hbar^2 r_d^3}{m_0 r_0^5}, \quad (4.43)$$

где r_d - атомный параметр, равный для железа $0,8 \text{ \AA} = 8 \cdot 10^{-11} \text{ м}$, r_0 - радиус атомной сферы, m_0 - масса электрона. Учитывая, что для ГЦК решетки

$$\frac{4}{3} \pi r_0^3 = \frac{a^3}{4},$$

выразим W_d , ΔW_d через a :

$$W_d = \frac{749,3 \hbar^2 r_d^3}{m_0 a^5}, \quad \Delta W = -5 W_d \frac{\Delta a}{a}. \quad (4.44)$$

При $a = 3,6 \text{ \AA} = 3,6 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ из (4.44) получаем $W_d \approx 4,85$ эВ. Рассмотрим изменение ΔW_d в процессе охлаждения γ -фазы желе-

за. По данным, имеющимся в [184], примем температурный коэффициент линейного расширения β равным $2,15 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Тогда охлаждение на $\Delta T = -100 \text{ K}$ дает

$$\frac{\Delta a}{a} = \beta \Delta T = -2,15 \cdot 10^{-3}, \quad \Delta W_d = 1,075 \cdot 10^{-2} W_d. \quad (4.45)$$

Подставляя (4.45) в (4.42), (4.41), находим

$$\Delta(\varepsilon_d - \mu) = 0,237 \cdot 1,075 \cdot 10^{-2} \text{ эВ} \approx 2,55 \cdot 10^{-3} \text{ эВ},$$

$$\Delta(\varepsilon_d - \mu) = -0,78 \cdot 1,075 \cdot 10^{-2} \text{ эВ} \approx -8,39 \cdot 10^{-3} \text{ эВ},$$

или $k_B^{-1} \Delta(\varepsilon_{d\uparrow} - \mu) \approx 30 \text{ K}$, $k_B^{-1} \Delta(\varepsilon_{d\downarrow} - \mu) \approx -100 \text{ K}$ по температурной шкале. Начальные точки $\tilde{M}_S^I(C = 0)$ при отображении на плоскость (T', Γ') , согласно (4.30), ложатся на одну прямую линию $1,05 T' = \Gamma'$, так что изменение параметра $\varepsilon_d - \mu$ приводит к смещению начальных точек $\tilde{M}_S^{III, IV}$ вдоль этой прямой. Координаты крайней точки \tilde{M}_S^{IV} для неполяризованного и поляризованного состояний соответственно равны $(T' \approx 0,245, \Gamma' \approx 0,257)$, $(T' \approx 0,298, \Gamma' \approx 0,313)$, тогда как на рис. 4.8, 4.4 координаты точки \tilde{M}_S^{IV} : $T' \approx 0,256, \Gamma' \approx 0,269$. В случае спин-поляризованного состояния точка \tilde{M}_S^{IV} смещается с линии постоянного уровня $\partial f / \partial \mu' \approx 0,14$ на линию постоянного уровня с $\partial f / \partial \mu' \approx 0,17$. Очевидно, что это смещение точек благоприятно для реализации оптимальных условий генерации. В то же время, смещение точки \tilde{M}_S^{IV} в случае неполяризованного состояния слегка уменьшает уровень $\partial f / \partial \mu' \leq 0,14$, поэтому случай поляризованного состояния имеет некоторое преимущество.

Отображения точек M_S , отвечающих сплавам с концентрацией $C_{\text{л.э.}}$ больше нескольких процентов, следует вести, учитывая как уменьшение коэффициента β , значения которого при подходе к комнатным температурам для сплавов на основе железа и сталей меньше в полтора-два раза (для сплавов Fe-Ni инварного состава в 10 раз) по сравнению со случаем γ -железа, так и зависимость параметра решетки от состава сплава. Согласно [181, 182], значение $a \approx 3,58 \text{ \AA}$ соответствует сплаву Fe - 30%Ni и практически не изменяется в интервале температур ниже 288 K (см. рис. 4.10), тогда

как для температуры $M_S^I = 1093$ К, с которой связано значение $\varepsilon_d - \mu$ (см. (4.30)), $a \approx 3,64$ Å. В табл. 4.4, 4.5 приведены Z_{Fe} для поляризованного состояния атомов железа, найденные из требования попадания точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ на линию 2 (при $T' \approx 0,137$, $\Gamma' \approx 0,92$) и линию 3 (при $T' \approx 0,137$, $\Gamma' \approx 1,17$), соответственно, с учетом изменения $\Delta a = -0,06$ Å.

Таблица 4.4. Зарядовые числа ионов никеля и железа при учете изменения параметра решетки в случае попадания точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ на линию 2 (пояснения см. в тексте)

Z_{Ni}	0,6	1,4
Z_{Fe}	0,87	1,10
ΔZ_{Fe-Ni}	0,27	- 0,30

Таблица 4.5. Зарядовые числа ионов никеля и железа при учете изменения параметра решетки в случае попадания точки $\tilde{M}_S^I = \tilde{M}_S^{IV}$ на линию 3 (пояснения см. в тексте)

Z_{Ni}	0,6	1,4
Z_{Fe}	0,90	1,06
ΔZ_{Fe-Ni}	0,30	- 0,34

В табл. 4.4, 4.5 включены только „средние“ конфигурации атомов железа, что соответствует предположению п. 2.5 о поляризации состояний с конфигурацией, близкой $3d^7 4s^1$. Сравнение данных табл. 4.2, 4.4 показывает, что изменение параметра решетки заметно сказывается на величине $\varepsilon_{d\uparrow} - \mu$, уменьшающейся при $\Delta a = -0,06$ Å на $6,4 \cdot 10^{-2}$ эВ (примерно на 27%), и величине $|\Delta Z|$, снижение которой приводит к дополнительному отклонению Z от единицы на 0,06. Для „крайних“ конфигураций, связываемых с неполяризованным состоянием железа, учет $\Delta a = -0,06$ Å приводит к росту $|\Delta Z|$, приблизительно в три раза меньшему приращения $|\Delta Z|$ для поляризованного состояния.

Таким образом, значения Z_{Fe} для спин-поляризованного состояния атомов железа при $Z_{Ni} = 0,6$ лежат в интервале $0,87 \div 0,91$, а при $Z_{Ni} = 1,4$ в интервале $1,04 \div 1,10$. Для модулей разностей чисел электронов, отдаваемых в s-зону атомами в бинарных сплавах замещения, имеем неравенства

$$|\Delta Z_{Fe-Co}| < |\Delta Z_{Fe-Ni}| < |\Delta Z_{Fe-Mn}|. \quad (4.46)$$

Следует отметить, что использованное в табл. 4.3 значение $|\Delta Z_{Fe-Co}| \approx 0,2$ отвечает приблизительному совпадению зависимости \tilde{M}_S^I с участком линии 1 на рис. 4.5. Однако, с точки зрения сохранения наибольшего уровня значений $\partial f/\partial \mu'$, $\partial f/\partial T'$ при изменении концентрации кобальта, выгодным было бы и совпадение чисел Z_{Fe} , Z_{Co} , то есть $\Delta Z_{Fe-Co} = 0$. Действительно, при $\Delta Z_{Fe-Co} = 0$ обращается в нуль вклад в затухание, обусловленный рассеянием на заряженной примеси, $\Gamma(C) = 0$, и на плоскости (T', Γ') точки \tilde{M}_S^I смещаются из начальных положений вверх вдоль прямой $1,05 T' = \Gamma'$. Координаты точки \tilde{M}_S^I изменяются от $(T' \approx 0,4, \Gamma' \approx 0,42)$ до $(T' \approx 0,426, \Gamma' \approx 0,447)$ при изменении концентрации кобальта от нуля до $C = 0,4$, а точки \tilde{M}_S^{III} , \tilde{M}_S^{IV} при $C = 0,4$ смещаются в положения, близкие, соответственно, \tilde{M}_S^I , \tilde{M}_S^{III} при $C = 0$. Из рис. 4.4, 4.5 видно, что при этом $\partial f/\partial \mu'$, $\partial f/\partial T'$ увеличиваются. Для сплавов же Fe - Ni, Fe - Mn обращение в нуль ΔZ_{Fe-Ni} , ΔZ_{Fe-Mn} крайне невыгодно, так как смещение точек \tilde{M}_S^i по линии $\Gamma' = 1,05 T'$ вниз быстро снижает уровни $\partial f/\partial \mu'$, $\partial f/\partial T'$.

Отметим также, что анализ примесного рассеяния, проведенный выше, не учитывал существующего в бинарных сплавах недиагонального беспорядка, обусловленного различием интегралов межузельных переходов электронов для компонент бинарного сплава [100]. Ясно, что дополнительный вклад в затухание $\Gamma(C)$ будет уменьшать величину ΔZ , поэтому найденные выше значения ΔZ следует рассматривать как оценки сверху истинных разностей чисел электронов, отдаваемых компонентами сплава в s-зону.

4.5.3 Оценка разности химических потенциалов γ - и α -фаз для подсистемы d-электронов

Используем формулу (4.43) для вычисления разности химических потенциалов $\Delta\mu = \mu_\gamma - \mu_\alpha$ аустенита и мартенсита, величина которой, наряду с $\partial a / \partial \mu'$, определяет уровень инверсной разности населенностей σ_0 . Напомним, что элементарная оценка $\Delta\mu$, справедливая для подсистемы s-электронов, была проведена в п. 1.5. Имея в виду необходимость совпадения оценок $\Delta\mu$, найденных для различных подсистем электронов, оценим $\Delta\mu$ в случае подсистемы d-электронов. Отсчитывая μ от дна d-зоны, допустим, что отношение μW_d^{-1} совпадает для γ - и α -фаз, тогда

$$\Delta\mu = \mu_\gamma - \mu_\alpha = (W_{d\gamma} - W_{d\alpha}) \frac{\mu_\gamma}{W_{d\gamma}} = \left(1 - \frac{W_{d\alpha}}{W_{d\gamma}}\right) \mu_\gamma. \quad (4.47)$$

Принимая использованную выше величину $\varepsilon_d^{np} - \mu \approx 0,78$ эВ за разность энергий между потолком d-зоны и уровнем Ферми γ -фазы, при $W_{d\gamma} \approx 4,85$ эВ, получаем $\mu_\gamma \approx 4,85 - 0,78 = 4,07$ эВ. Учитывая далее, что для ОЦК решетки на один атом приходится объем

$$\frac{4}{3} \pi r_0^3 = \frac{1}{2} a_\alpha^3,$$

выражаем из (4.43), аналогично (4.44), $W_{d\alpha}$ через параметр решетки a_α и находим отношение

$$\frac{W_{d\alpha}}{W_{d\gamma}} = \left(\frac{a_\gamma}{2^{1/3} a_\alpha}\right)^5 \approx 0,961, \quad (4.48)$$

где использовано отношение $a_\alpha = 0,8a_\gamma$, типичное для деформации Бейна (см. рис. 1.1 и пояснение к нему). Подставляя $\mu_\gamma = 4,07$ эВ в (4.47), с учетом (4.48), получаем $\Delta\mu \approx 0,16$ эВ, согласующееся с ранее найденной оценкой для подсистемы s-электронов.

4.6 Зависимость $M_S(C)$ для сталей и степень ионизации атомов углерода

Подход к анализу концентрационной зависимости температуры M_S в бинарных сплавах замещения можно попытаться распространить

и на твердые растворы внедрения, из которых наибольший интерес представляет система Fe-C. Будем считать, что атомы углерода случайным образом заполняют только октаэдрические поры аустенита [13]. Допустим далее, что ион железа, вблизи которого локализован атом углерода, характеризуется зарядовым числом Z_{FeC} и играет роль иона „легирующего элемента“, замещающего ион железа с зарядовым числом Z_{Fe} , отличающимся от Z_{FeC} . Тогда отыскание $\Gamma(C)$ - вклада в затухание s-электронов, обусловленного примесным рассеянием, сводится к задаче о рассеянии электронов шестиатомными октаэдрическими кластерами, концентрация которых совпадает с концентрацией углерода. Данная задача не является ни тривиальной, ни до конца решенной (см., например, [102, 185]). Ограничиваясь качественным рассмотрением, для оценки нижней границы значений $\Gamma(C)$ примем, что при рассеянии на кластере s-электрон взаимодействует только с одним (ближайшим к s-электрону) из шести „примесных“ ионов. В этом случае анализ зависимости $M_S(C)$ может проводиться так же, как и для твердых растворов замещения в п. 4.4, 4.5. Согласно [165], при увеличении концентрации углерода в стали темп снижения M_S примерно в четыре и два раза больше, чем в сплавах Fe - Ni и Fe - Mn, соответственно. Так, например, температуре $M_S^{IV} \approx 473$ К в системах Fe - C, Fe - Mn, Fe - Ni отвечают примерно 4,6 ат.% C (1 вес.% C), 10,5 ат.% Mn, 22 ат.% Ni. В табл. 4.6 приведены значения Z_{FeC} , найденные при тех же, что и в п. 4.4 параметрах $W_s = 10$ эВ, $\varepsilon_d - \mu \approx 0,237$ эВ без коррекции, связанной с изменением параметра решетки.

Таблица 4.6. Зарядовые числа ионов железа, принадлежащих (Z_{FeC}) и не принадлежащих (Z_{Fe}) октаэдрическим кластерам с внедренным атомом углерода

Z_{Fe}	0,09	0,91		1,04		1,89
Z_{FeC}	1,08	0,42	1,53	1,62	0,52	0,86
ΔZ	- 0,99	0,49	- 0,62	- 0,58	0,52	1,03

Сравнивая данные табл. 4.6, 4.1, видим, что для „средних“ кон-

фигураций железа увеличение темпа снижения M_S в два раза требует увеличения ΔZ на $0,1 \div 0,15$. Напомним, что аналогичный вывод был сделан в п. 4.4 при сравнении темпов изменения M_S в сплавах Fe - Ni, Fe- Mn.

Результаты измерений магнитной восприимчивости сплавов Fe - C [186] указывают на увеличение концентрации электронов d-полосы при росте содержания углерода. Заполнению d-полосы за счет электронов углерода при локальной трактовке, вероятно, соответствует гибридизация 2p-волновых функций углерода с 3d-функциями железа e_g -симметрии, которая должна сопровождаться уменьшением зарядового числа ионов железа в октаэдрическом кластере. Полагая, что отличие Z_{FeC} от Z_{Fe} обусловлено только дополнительным притоком электронов от атома углерода, из значений Z_{FeC} в табл. 4.6 следует оставить лишь $Z_{FeC} = 0,42$ (при $Z_{Fe} = 0,91$) и $Z_{FeC} = 0,52$ (при $Z_{Fe} = 1,04$); $Z_{FeC} = 0,88$ (при $Z_{Fe} = 1,89$) следует отбросить, так как поступление одного электрона на ион ($\Delta Z = 1$), при эквивалентности шести ионов железа в кластере, означало бы полную ионизацию атома углерода. Степень ионизации атома углерода равна

$$6 \Delta Z = 6 (Z_{Fe} - Z_{FeC}) \approx \begin{cases} 2,94, & Z_{Fe} = 0,91 \\ 3,12, & Z_{Fe} = 1,04 \end{cases}, \quad (4.49)$$

то есть атом углерода отдает в d-зону приблизительно три электрона.

Учет однородного изменения параметра решетки (см. п. 4.5.2) приводит к уменьшению $(\varepsilon_{d\uparrow} - \mu)$ до 0,215 эВ для сплава Fe-C (1 вес.% C) при $T = M_S^{IV} \approx 473$ К. В табл. 4.7 приведены Z_{FeC} с коррекцией на изменение a (значения Z_{Fe} взяты из табл. 4.4), найденные из требования попадания точки \tilde{M}_S^{IV} для сплава Fe-C (1 вес.% C) в окрестность линии 2 на рис. 4.4 (при $T' \approx 0,19$, $\Gamma' \approx 0,82$).

При расчете поправки, связанной с неоднородным изменением объема, величину ΔZ в табл. 4.7 следует отождествить с $\Delta Z'$ в (4.39).

Используя концентрационную зависимость параметра решетки

Таблица 4.7. Зарядовые числа Z_{Fe} , Z_{FeC} при учете изменения параметра решетки a

Z_{Fe}	0,87	1,1
Z_{FeC}	0,42	0,59
ΔZ	0,45	0,51

аустенита [13] $a_\gamma = (3,578 + 0,00645C)\text{\AA}$, где C - доля атомов углерода, из (4.39) получаем

$$\Delta Z = \Delta Z' + \frac{1 + \sigma_{Fe}}{1 - \sigma_{Fe}} \frac{Z_{Fe}}{6a} \frac{da}{dC} \approx \begin{cases} 0,47, & Z_{Fe} \approx 0,87 \\ 0,57, & Z_{Fe} \approx 1,1. \end{cases} \quad (4.50)$$

Множитель $1/6$ во втором слагаемом в (4.50) учитывает, что на отдельный ион железа октаэдрического кластера приходится шестая часть неоднородного увеличения объема при внедрении атома углерода. Степень ионизации атома углерода

$$6 \Delta Z \approx \begin{cases} 2,82, & Z_{Fe} \approx 0,87 \\ 3,42, & Z_{Fe} \approx 1,1, \end{cases}$$

найденная с учетом изменений параметра решетки аустенита, незначительно отличается от результатов (4.49). Значение $6\Delta Z \approx 3,42$ дает, по-видимому, верхнюю границу степени ионизации атома углерода, так как предположение, сводящее рассеяние s-электрона кластером к рассеянию только на одном из шести ионов железа, может уточняться лишь в сторону увеличения числа ионов, рассеивающих s-электрон, что повлечет за собой увеличение Z_{Fe} и уменьшение ΔZ . Заметим, однако, что вывод о максимальности значения $6\Delta Z \approx 3,42$ получен при дополнительном условии попадания точки \tilde{M}_S^{IV} для сплава Fe - C (1 вес. % C) в окрестность линии 2. Если для того же сплава потребовать попадания точки \tilde{M}_S^{IV} в окрестность линии 3 на рис. 4.4, то величина степени ионизации возрастет до $6\Delta Z \approx 3,78$. Это значение является промежуточным по отношению к значениям 3,5 и $3,9 \div 4$, найденным в [186] и [187] соответственно из анализа магнитной восприимчивости систем Fe

- С в модели квазижесткой d-зоны при $Z_{Fe} \approx 1$ и с помощью данных о диффузии углерода в постоянном электрическом поле (метод электропереноса).

4.7 Заключение к главе 4

Выполненные для сплавов замещения (Fe -Ni, Fe -Mn, Fe -Co) и внедрения (Fe-C) оценочные расчеты позволяют сделать основной вывод о возможности сохранения условий для эффективной генерации фононов неравновесными 3d-электронами в широком диапазоне концентраций второго компонента сплава.

Методической основой анализа служило использование функции распределения электронов, учитывающей наряду с тепловым дополнительное „размытие“, обусловленное неоднородностью системы. Отметим, что формирование модифицированного равновесного распределения d-электронов (см. п. 4.2), степень „размытия“ которого определяется главным образом затуханием s-электронов, лимитируется временем τ_{d-s} процесса d-s рассеяния электронов. Поскольку неравновесная добавка к модифицированной функции распределения не может быть сформирована раньше возникновения самого равновесного распределения, время τ_{d-s} будет определять наименьшее время τ_{σ} -установления инверсной разности населенностей σ_0 (время накачки). С этой точки зрения использованное в гл. 3 при оценке деформации ε значение $\tau_{\sigma} \sim 10^{-12}$ с представляется вполне приемлемым.

Исследование поведения неравновесных добавок к функции распределения электронов обнаружило существование оптимальной для генерации волн области значений температур T и затуханий Γ (затухание электронов зависит от концентрации C второго компонента в сплаве), для которой характерны высокий уровень значений и медленное изменение неравновесных добавок при одновременном изменении T и C .

Следующий этап анализа заключался в отображении реальных концентрационных зависимостей температур начала мартенситного превращения $M_S(C)$ в область оптимальных значений парамет-

ров T , Γ . В Γ выделялся вклад примесного рассеяния, которое рассматривалось как слабое рассеяние, связанное с диагональным беспорядком в системе (рассеяние на примесных атомах, замещающих в узлах решетки атомы матрицы, при сохранении характерных для матрицы значений межузельных интегралов перескока).

Выбор (на основе литературных данных) в качестве реперных электронных конфигураций атома никеля, позволил установить электронные конфигурации железа, кобальта, марганца и углерода, совместимые с отображением зависимости $M_S(C)$ в область оптимальных значений параметров T и Γ . Из трех рассмотренных сплавов замещения различие ΔZ - чисел электронов, отдаваемых атомами компонентов сплава в общую s-зону, оказалось наименьшим для сплава Fe-Co: $|\Delta Z|_{Fe-Co} = (0 \div 0,2)$ и наибольшим для сплава Fe - Mn: $|\Delta Z|_{Fe-Mn} = (0,4 \div 0,5)$ в случае конфигурации атома железа, близкой $3d^7 4s^1$. Интересно, что в модели с диагональным беспорядком двукратное превышение темпа снижения $M_S(C)$ в сплавах Fe - Mn при увеличении концентрации марганца над темпом снижения $M_S(C)$ в сплавах Fe - Ni достигается при $|\Delta Z|_{Fe-Mn} - |\Delta Z|_{Fe-Ni} \leq 0,1$. Этот вывод подтвердился и при сравнении темпов снижения в системах Fe - Mn, Fe - C.

В хорошем согласии с обсуждавшимися в п. 2.5 значениями $0,2 \div 0,3$ эВ оказывается использованная при отображении зависимости $M_S(C)$ величина параметра $\varepsilon_d - \mu = (0,17 \div 0,26)$ эВ. Напомним, что за начальное (при температуре $M_S^I(0) = 1093$ K) выбрано значение $\varepsilon_d - \mu \approx 0,237$ эВ, а интервал значений связан с учетом зависимости $\varepsilon_d - \mu$ от величины параметра решетки.

В количественном отношении представляется важной и оценка величины $\partial f / \partial \mu'$, определяющей, наряду со значением $\nabla \mu$, начальную инверсию населенностей σ_0 . Как следует из рис. 4.4, вблизи линии 2 максимумов функции $\partial f(\Gamma', T') / \partial \mu'$ по переменной Γ' выполняются неравенства $0,21 \geq \partial f / \partial \mu' \geq 0,15$, позволяющие в качестве минимального значения при оценке σ_0 использовать $\partial f / \partial \mu' \approx 0,15$. Отметим, что использованное в п. 3.3 при оценке деформации ε (см. формулу (3.42)) значение $|\partial f / \partial \mu'| \approx 0,1$ было в полтора раза меньше.

Отметим также, что характер линий постоянного уровня на рис. 4.4, 4.5 (зеркально отраженные С-образные кривые) не требует жесткого следования зависимости $\tilde{M}_S(C)$ ходу линий 2 или 3. В общем случае, не обязательно относящемся к сплавам на основе железа, допустимы различные варианты. Например, для низкой температуры M_S и значений $\varepsilon_d - \mu \approx k_B M_S$ отображение \tilde{M}_S на плоскость (T', Γ') может иметь координаты $(T' \approx 1, \Gamma' \approx 0)$, то есть далеко выходить за пределы области, ограниченной линиями 1 и 2; однако значение $\partial f / \partial \mu' \approx 0,2$ в этой точке велико и будет сохраняться постоянным при смещении вдоль линии постоянного уровня, сопровождающемся увеличением Γ' и снижением T' . Если же начальные координаты \tilde{M}_S лежат вблизи $T' \approx 0,4, \Gamma' \approx 0$, то значение $\partial f / \partial \mu' \approx 0,18$ может сохраняться при росте Γ' вначале при уменьшении, а затем при возрастании температуры. Возможна и ситуация, когда для части ветвей (ступеней) зависимости $M_S(C)$ температура M_S уменьшается при увеличении C , а для других возрастает. Это иллюстрирует рис. 4.12. Видно, что движение от точки I при увеличении Γ' вдоль линии постоянного уровня снижает \tilde{M}_S^I . Охлаждение (без изменения состава) переводит систему из точки I в точку II. Смещение же от точки II вдоль линии постоянного уровня $\partial f / \partial \mu' = \text{const}$ при росте Γ' сопровождается увеличением \tilde{M}_S^{II} вплоть до пересечения ветвей \tilde{M}_S^I и \tilde{M}_S^{II} . Подобное поведение ветвей $M_S^i(C)$ наблюдается в сплавах Fe - Mo [162, 188].

Разумеется, при анализе различий зависимостей $M_S^i(C)$ в сплавах на основе железа не следует забывать о существующем термодинамическом ограничении

$$T_0(C) - M_S(C) \geq |\Delta T|_{\min} \sim 10^2 \text{ K}, \quad (4.51)$$

показывающем, что при $\gamma - \alpha$ - превращении точка M_S лежит ниже температуры равновесия фаз T_0 на конечную величину порядка 10^2 K. В случае убывания $T_0(C)$ при росте C ($\partial T_0 / \partial C < 0$) условие $\partial M_S / \partial C > 0$ вступает в противоречие с ограничением (4.51), так что все $M_S^i(C)$ должны убывать при росте C , как это и наблюдается в сплавах Fe - Ni, Fe - Mn, Fe - C. Если же $T_0(C)$ растет при увеличении C ($\partial T_0 / \partial C > 0$), то, без противоречия с (4.51), M_S^i могут

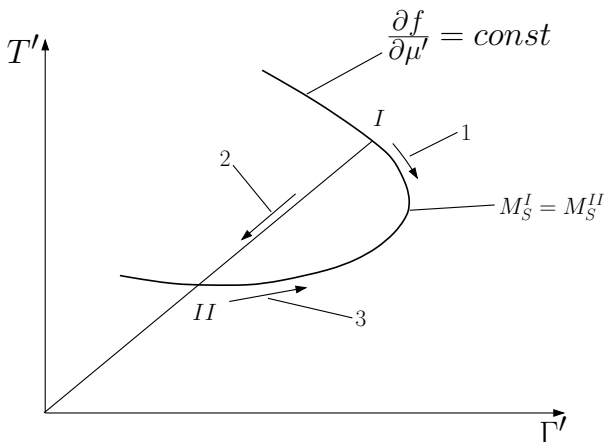


Рис. 4.12. Один из вариантов описания двух ступеней концентрационной зависимости $M_S^{I,II}(C)$ на плоскости переменных Γ' , T' : движение по линии постоянного уровня $\partial f/\partial\mu' = const$ от точки I вдоль пути 1 соответствует уменьшению M_S^I при увеличении концентрации легирующего элемента, движению вдоль пути 3 из точки II отвечает рост M_S^{II} , путь 2 описывает охлаждение без изменения состава сплава

и возрастать (сплавы Fe-Co, Fe-Al) и убывать (сплавы Fe - Cr) при росте C , сохраняя высокий уровень $\partial f/\partial\mu'$, причем выбор между этими двумя возможностями в модели сплава с диагональным беспорядком определяется величиной ΔZ - разности зарядовых чисел компонент сплава. При малых $\Delta Z \leq 0,1$ выгодно возрастание M_S , а при больших $\Delta Z > 0,3$ - убывание M_S .

В общем случае вместо сравнения ΔZ необходимо сравнивать производные $\partial\Gamma(C)/\partial C$ для разных сплавов. Так, неравенства (4.46) конкретизируют соотношения

$$\left. \frac{\partial\Gamma}{\partial C} \right|_{Fe-Co} < \left. \frac{\partial\Gamma}{\partial C} \right|_{Fe-Ni} < \left. \frac{\partial\Gamma}{\partial C} \right|_{Fe-Mn}$$

в модели сплава с диагональным беспорядком.

Таким образом, приведенная трактовка концентрационной зависимости $M_S(C)$ обосновывает возможность поддержания высокого уровня инверсии населенностей в широких диапазонах изменения температуры и концентрации легирующего элемента и дает про-

стое объяснение причин различия в поведении $M_S(C)$ для сплавов на основе железа, включая сплавы с элементами, замыкающими область существования γ -фазы (более широкий, чем упоминался в главе 4, перечень элементов имеется в [7]).

Результаты, положенные в основу при написании главы 4, опубликованы в работах [90, 189, 190]. Частично анализ электронной конфигурации атома железа в сплавах Fe - Ni, проведенный в [190], использован в [191].

Глава 5

Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита в модели фононного мазера

В сплавах на основе железа продукт $\gamma - \alpha$ превращения - ОЦК (или ОЦТ) мартенсит обладает богатым спектром морфологических признаков (см. п. 1.2). Морфология несомненно содержит информацию о динамическом механизме мартенситного превращения (МП), знание которого необходимо для отыскания путей эффективного внешнего воздействия на МП. Поэтому представляется полезным построение моделей, позволяющих подобную информацию извлекать. В модели фононного мазера (см. гл. 2.3) акцентируется внимание на неравновесных условиях, существующих вблизи границы растущей фазы, и показывается возможность возникновения волн смещений решетки с амплитудами, достаточными для начала пластической деформации. Это позволяет трактовать стадию роста как процесс, управляемый распространяющимися в исходной фазе волнами. Важно, что постановка задачи о генерации волн допускает, в принципе, установление связи между волнами и особенностями электронного спектра. Интерпретация же морфологии в волновой схеме распространяет эту связь на наблюдаемые макрохарактеристики (например, габитусные плоскости), что позволяет анализировать причины их изменения при изменении состава или внешних условий.

5.1 Габитусы кристаллов в сплавах Fe - Ni, Fe - C

Качественная схема описания габитусной плоскости, выбираемой в качестве базового морфологического признака, была изложена в пункте 7 постановки задачи в п. 1.5. Количественное рассмотрение начнем с решения задачи сопоставления плоскостей и волн.

5.1.1 Сопоставление плоскости с парой волн

Формально произвольную плоскость можно связать с волнами по крайней мере двумя способами: во-первых, отождествляя ее с волновым фронтом плоской волны и, во-вторых, с геометрическим местом точек, заметаемых линией пересечения фронтов пары бегущих плоских волн. Первый случай тривиален, а на втором остановимся несколько подробнее. Обозначим \mathbf{c}_1 и \mathbf{c}_2 непараллельные скорости волн и учтем, что их векторное произведение $[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]$ коллинеарно линии пересечения фронтов волн, движущейся со скоростью \mathbf{c} . Тогда в качестве вектора \mathbf{N} , коллинеарного нормали к плоскости, определяемой векторами $[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]$ и \mathbf{c} , можем взять двойное векторное произведение:

$$\mathbf{N} = [\mathbf{c}, [\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]] = \mathbf{c}_1 c_2^2 - \mathbf{c}_2 c_1^2. \quad (5.1)$$

Соотношение (5.1) решает прямую задачу отыскания \mathbf{N} при известных $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$. Решение обратной задачи (отыскание пары волн при известном \mathbf{N}) заведомо неоднозначно, но с помощью (5.1) легко установить условия, ограничивающие степень неоднозначности. Поскольку \mathbf{N} является линейной комбинацией векторов $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$, то векторы $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{N}$ лежат в одной плоскости, и их смешанное скалярно-векторное произведение равно нулю при любой комбинации множителей:

$$(\mathbf{N}, [\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]) = (\mathbf{c}_1, [\mathbf{N}, \mathbf{c}_2]) = (\mathbf{c}_2, [\mathbf{N}, \mathbf{c}_1]) = 0. \quad (5.2)$$

Вынося в (5.1) множитель $c_2 c_1^2$, представим (5.1) в виде:

$$\mathbf{N} \parallel \mathbf{n}_1 \kappa - \mathbf{n}_2 \quad (5.3)$$

где

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{c}_1 c_1^{-1}, \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{c}_2 c_2^{-1}, \quad \kappa = c_2 c_1^{-1}. \quad (5.4)$$

5.1.2 Габитус (2 2 5)

Переходя к интерпретации конкретных габитусных плоскостей, напомним (см. п. 1.2), что в системах Fe - C, Fe - Ni наблюдаются габитусные плоскости, близкие к $\{5\ 5\ 7\} \div \{1\ 1\ 1\}$ -(до 0,6 вес.% C, до 29% Ni), $\{2\ 2\ 5\}$ -(0,6-1,4 вес.% C), $\{2\ 5\ 9\} \div \{3\ 10\ 15\}$ - (1,4-1,8% C, 29-34% Ni). В соответствии с пунктом 7 п. 1.5 постановки задачи и выводами глав 2, 3 при описании габитусных плоскостей будем использовать пары продольных (квазипродольных) волн, распространяющихся вблизи ортогональных направлений $\langle 001 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ ГЦК решетки, считая, что мартенситное превращение инициируется волнами в тех областях аустенита, для которых реализуются пороговые значения деформации $\varepsilon \sim \varepsilon_{th}$ и фазовые соотношения смещений атомов в бегущих волнах, благоприятные для процесса деформации Бейна (геометрическая схема деформации Бейна обсуждалась в п. 1.4, см. рис. 1.1).

Рассмотрение начнем с габитусов $\{2\ 2\ 5\}$. Особый интерес к ним обусловлен, с одной стороны, тем, что именно при их отыскании кристаллогеометрическая теория испытывает наибольшие трудности [13], а с другой стороны, промежуточным положением по концентрации углерода мартенсита с этими габитусами, что оказывается удобным при сравнительном описании как габитусов первой, так и третьей групп.

Предварительно заметим, что если выбрать скорость одной из волн в направлении $\mathbf{c}_1 \parallel [00\bar{1}]$ (направление Δ - ось симметрии 4 порядка), то, как следует из (5.2) и (5.3), габитус вида $(h\ h\ l)$, где $h, l > 0$ можно описать, выбирая вторую волну

со скоростью $c_2 \parallel [11\eta]$ при

$$\varkappa = \frac{c_2}{c_1} = \frac{l - \eta h}{h \sqrt{2 + \eta^2}}. \quad (5.5)$$

Далее, считая волны относительно длинноволновыми (см. обсуждение в гл. 2), естественно допустить, что их роль состоит в выделении макрообластей с наиболее благоприятными условиями для превращения. При такой точке зрения интерпретацию особенностей внутреннего строения пластины мартенсита (тонкой структуры) следует вести, используя картину согласованного действия длинноволновых и коротковолновых смещений. Напомним теперь, что пластина с габитусом (225) состоит из тонких пластинок (110) двойников превращения, у которых чередуются главные оси $[100]$ и $[010]$ деформации Бейна. Отсюда ясно, что, акцентируя внимание на описании чисто бейновской деформации, легко оправдать выбор скорости одной из продольных волн $c_1 = c_\Delta$ в направлении $[00\bar{1}]$. Согласованность действия такой волны с коротковолновыми смещениями будет состоять в растяжении решетки в направлении $[00\bar{1}]$, которое в равной мере необходимо при деформации Бейна с осями сжатия $[100]$ и $[010]$. Что же касается волны вдоль $[11\eta]$, то по отношению к ней, как и в случае первой волны, оба типа двойников равноправны. Кроме того, если это квазипродольная волна, то она будет способствовать чередующемуся в направлениях $[010]$ и $[100]$ бейновскому сжатию тем больше, чем ближе значение η к нулю, то есть, чем ближе c_2 к направлению Σ .

Для заданного сплава значение $\varkappa_0 = \varkappa(\eta_0)$, отвечающее габитусу (225), определяется точкой пересечения экспериментальной $\varkappa_e(\eta)$ и теоретической $\varkappa_{T1}(\eta)$ кривых: $\varkappa(\eta_0) = \varkappa_e(\eta_0) = \varkappa_{T1}(\eta_0)$. Кривая $\varkappa_{T1}(\eta)$ в соответствии с формулой (5.5) в интервале $0 < \eta < 1$ монотонно убывает от значения $\varkappa(0) \approx 1,77$ до $\varkappa(1) \approx 0,87$. Очевидно, что однозначное решение \varkappa_0 для η_0 из интервала $0 < \eta < 1$ существует, если кривая $\varkappa_e(\eta)$ является монотонно возрастающей, с начальным значением $\varkappa_e(0)$ из интервала: $0,87 < \varkappa_e(0) < 1,77$. Поскольку обычно для продольных волн выполняются неравенства $c_\Delta < c_\Sigma < c_\Lambda$, то условие монотонного

нарастания $\varkappa_e(\eta)$ выполняется, кроме того, $\varkappa_e(0) = c_\Sigma c_\Delta^{-1} > 1$, и остается лишь ограничение $\varkappa_e(0) < 1,76$. С учетом указанного ограничения, наверняка выполняющегося в интересующих нас системах, однозначное решение существует. Результаты анализа иллюстрирует правая часть рисунка 5.1, где почти горизонтальная кривая \varkappa_e отражает слабое изменение скорости продольной волны при переходе от Σ - к Λ - направлению -оси симметрии третьего порядка. Как уже отмечалось, наиболее интересны направления c_2 , близкие к Σ - направлению. Из рисунка видно, что такое приближение происходит при возрастании $\varkappa_e(0)$.

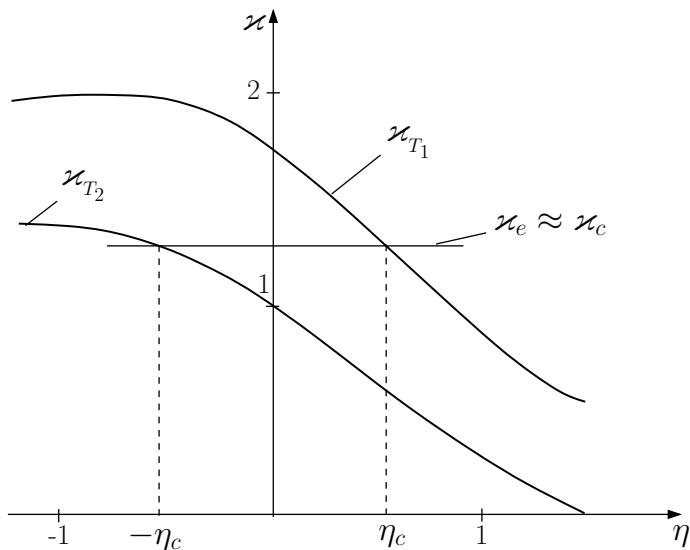


Рис. 5.1. Графическая схема нахождения индекса η_0 , определяющего направление $[11\eta_0]$ скорости квазипродольной волны смещений. Показан „критический“ случай: значению $\eta_0 = \eta_c$ отвечает габитусная плоскость (225), а $\eta_0 = -\eta_c$ плоскость (557). Определения функций $\varkappa_T(\eta)$ и $\varkappa_e(\eta)$ даны в тексте

5.1.3 Габитус (5 5 7). Критерий смены габитуса (5 5 7) на (2 2 5)

Принадлежность габитуса (5 5 7) к общему с (2 2 5) типу (h h l), возможность их сосуществования в пограничной области концентраций углерода вблизи 0,6% C наводят на мысль попытаться описать эти пластинки парой волн $\mathbf{c}_1 \parallel [00\bar{1}]$, $\mathbf{c}_2 \parallel [11\eta]$ аналогично габитусу (2 2 5). Такое описание возможно, но решение уравнения $\kappa(\eta_0) = \kappa_{T2}(\eta_0) = \kappa_e(\eta_0)$ определено на отрицательном интервале $-1 < \eta_0 < 0$. На рис. 5.1 в левой его половине в соответствии с (5.5) построена кривая $\kappa_{T2}(\eta)$ для габитуса (557), которая монотонно нарастает от $\kappa_{T2}(0) \approx 1$ до $\kappa_{T2}(-1) \approx 1,386$. По мере увеличения $\kappa_e(0) > 1$ направление скорости \mathbf{c}_2 удаляется от направления Σ , то есть ведет себя противоположно случаю габитуса (2 2 5). Очевидно, что существует значение η_c (назовем его критическим), когда $\kappa_{T1}(\eta_c) = \kappa_c = \kappa_{T2}(-\eta_c) \approx \kappa_e(0)$. Этому равенству удовлетворяет $\eta_c \approx 0,55$, причем $\kappa_c \approx 1,285$. Количественный критерий, разделяющий случаи, когда динамические условия более благоприятны для образования одного из габитусов, имеет простой вид:

$$\begin{aligned} (225) - \kappa_e(0) &> \kappa_c, \\ (557) - \kappa_e(0) &< \kappa_c. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Ясно, что в области значений $\kappa_e(0) \approx \kappa_c$ оба габитуса могут сосуществовать. Если предположить, что увеличение концентрации углерода ведет к постепенному росту $\kappa_e(0)$, а значение κ_c достигается при концентрациях вблизи 0,6% C, то дальнейший рост $\kappa_e(0) > \kappa_c$ должен сопровождаться сменой габитуса (5 5 7) на (2 2 5).

Подобное влияние углерода качественно можно объяснить, учитывая, что углерод, внедряясь в октаэдрические поры [13], при гибридизации своих 2p-функций с 3d-функциями железа e_g -симметрии, как уже обсуждалось выше в п. 4.6, уменьшает эффективный положительный заряд ионов Z, в поле которых движутся свободные 4s-электроны. Это должно вести к уменьшению скорости продольного звука, так как, согласно известным выводам модели „желе“ [192], скорость звука $c \sim Z^{1/2}$. Вероятно, из-за анизотропии

2р-функций рост параметра $\varkappa_e(0) = c_\Sigma c_\Delta^{-1}$ в случае системы Fe - C в основном связан с уменьшением скорости c_Δ при увеличении концентрации углерода (сравнение c_Δ в разных сплавах должно проводиться при одинаковой температуре). В общем случае допустима и ситуация, когда рост $\varkappa_e(0)$ связан с более быстрым ростом скорости c_Σ по сравнению с c_Δ .

Интересно, что с критерием (5.6) согласуется отсутствие заметного диапазона концентраций Ni для габитуса (225) в системах Fe - Ni. Как показывают эксперименты [38], $\varkappa_e(0)$ может достигать значения \varkappa_c лишь для 33% Ni в ферромагнитном аустените. Причем до магнитного упорядочения $\varkappa_e(0)$ имеет значения 1, $12 \div 1$, 15, явно меньшие \varkappa_c .

Результаты применения этого подхода для случая ортогональных волн $\mathbf{c}_1 \parallel [\eta/2 \ \eta/2 \ \bar{1}]$, $\mathbf{c}_2 \parallel [1 \ 1 \ \eta]$, где уже \mathbf{c}_1 не параллельна $[00\bar{1}]$, с учетом вариации габитуса от (557) до (111) приведены в таблице 5.1. Здесь θ_c - угол между $[11\eta_c]$ и $[110]$; η_c , определяемый

Таблица 5.1. Значения \varkappa_c , η_c , θ_c для трех пар габитусов

Пары габитусов	\varkappa_c	η_c	θ_c , градусы
(225), (557)	1,3083	0,1962	7,8966
(225), (667)	1,1923	0,2619	10,4913
(225), (111)	1,1061	0,3166	12,6197

из равенства отношений модулей скоростей $\varkappa = c_2 c_1^{-1}$ для разных габитусов вида $(h_1 \ h_1 \ l_1)$ и $(h_2 \ h_2 \ l_2)$, дается формулой

$$\eta_c = \sqrt{2 + b^2} - |b|, \quad b = \frac{2 h_1 h_2 + l_1 l_2}{h_1 l_2 - h_2 l_1}, \quad (5.7)$$

а \varkappa_c находится подстановкой $\eta = \eta_c$ в

$$\varkappa = \frac{c_2}{c_1} = \frac{(l - h \eta) \sqrt{2}}{2 h + l \eta}. \quad (5.8)$$

В (5.7) и (5.8) положительным η отвечают индексы $l = l_2 = 5$, $h = h_2 = 2$. Из данных табл. 5.1 видно, что для пар волн с ортогональными \mathbf{c}_1 и \mathbf{c}_2 увеличение \varkappa способствует переходу от габитусов

(557) к (225) с уменьшением углов отклонения θ от осей симметрии второго и четвертого порядка. Заметим также, что отклонение первой волны от оси $[00\bar{1}]$ позволяет существенно снизить отклонение второй волны от оси $[110]$ по сравнению со случаем $\mathbf{c}_2 \parallel [00\bar{1}]$. Разумеется, при $\kappa \approx \kappa_c$ возможно сосуществование кристаллов с габитусами (557) и (225). Так, например, в $[165]$ подобное сосуществование наблюдалось при скоростном охлаждении сталей, содержащих $< 0,6 \text{ \% C}$.

5.1.4 Габитусы $\{15\ 3\ 10\} \div \{9\ 2\ 5\}$

Характерной чертой мартенсита с третьей группой габитусов является внутреннее двойникование. Для габитусов $(15\ 3\ 10)$ и $(9\ 2\ 5)$ оси бейновского сжатия в основной и двойниковой компонентах совпадают с $[001]$ и $[010]$. Поэтому аналогично случаю габитуса $(2\ 2\ 5)$ в качестве первой волны, способствующей растяжению при бейновской деформации для обеих двойниковых компонент, следует выбирать продольную волну со скоростью $\mathbf{c}_1 \parallel [\bar{1}00]$. Тогда из (5.2) для скорости второй волны находим: $\mathbf{c}_2 \parallel [\eta\ 0,3\ 1]$ и $\mathbf{c}'_2 \parallel [\eta\ 0,4\ 1]$ (штрихом далее мы будем отмечать результаты, относящиеся к описанию габитуса $(9\ 2\ 5)$). Строя по формуле (5.4) кривые $\kappa_T(\eta)$ на отрезке $0 \leq \eta \leq 0,3$, $\kappa'_T(\eta)$ на отрезке $0 \leq \eta \leq 0,4$, легко убедиться, что они монотонно убывают, а на границах отрезков имеют значения: $\kappa_T(0) \approx 1,44$, $\kappa_T(0,3) \approx 1,1$; $\kappa'_T(0) \approx 1,67$, $\kappa'_T(0,4) \approx 1,22$. Очевидно, что для экспериментальных кривых $\kappa_e(\eta)$, $\kappa'_e(\eta)$, монотонно возрастающих с ростом η , при значениях $1,1 < \kappa_e(0) < 1,44$, $1,22 < \kappa'_e(0) < 1,67$ существуют однозначные решения уравнений $\kappa_e(\eta) = \kappa_T(\eta)$, $\kappa_e(\eta) = \kappa'_T(\eta)$. Используя данные [38] для Fe - 33% Ni и формулы для расчета скоростей продольного звука в направлениях, лежащих в плоскостях симметрии кубических кристаллов [193], получаем $\kappa_e(0) \approx 1,1$, $\kappa_e(0,3) \approx 1,22$, и для второй волны: $\mathbf{c}_2 \parallel [0,22\ 0,3\ 1]$, $\mathbf{c}'_2 \parallel [0,34\ 0,4\ 1]$. Необходимо отметить, что по сравнению со случаем габитуса $(2\ 2\ 5)$ двойники уже неравноправны по отношению ко второй волне. Очевидно, что эта волна в большей степени спо-

собствует сжатию в направлении $[001]$; в результате, как показывает опыт [13], соответствующие двойники имеют большую толщину по сравнению с двойниками, ось бейновского сжатия которых $[010]$.

Удобную форму записи осей и плоскостей, существенных при описании морфологических признаков двойникового мартенсита, в случае произвольного габитуса из совокупности $\{h\ k\ l\}$ легко получить, полагая, что $|h| < |k| < |l|$. Тогда для габитусов $\{h\ k\ l\} - \{3\ 10\ 15\} \div \{2\ 5\ 9\}$ направление $\langle 0\ 0\ l / |l| \rangle$ (позиция единицы совпадает с позицией наибольшего по модулю индекса l) коллинеарно направлению распространения волны со скоростью \mathbf{c}_1 , инициирующей $\gamma - \alpha$ превращение в фазе растяжения. Ось $\langle 0\ k / |k|\ 0 \rangle$ (позиция единицы совпадает с позицией среднего по модулю индекса k) дает направление главной оси бейновского сжатия, ось $\langle h / |h|\ 0\ 0 \rangle$ (позиция единицы совпадает с позицией наименьшего по модулю индекса h) дает ось бейновского сжатия для меньшей по объему двойниковой составляющей. Плоскость двойникового записывается в виде $\{h / |h|\ k / |k|\ 0\}$.

Та же символика может быть использована для указания ориентации нормалей $\langle h\ k\ l \rangle$ к габитусам $\{h\ k\ l\}$ на стереографической проекции, широко используемой при кристаллографическом анализе. А именно: полюс $\langle h\ k\ l \rangle$ лежит внутри ориентационного треугольника, вершины которого

$$\langle 0\ 0\ \frac{l}{|l|} \rangle, \quad \langle 0\ \frac{k}{|k|}\ \frac{l}{|l|} \rangle, \quad \langle \frac{h}{|h|}\ \frac{k}{|k|}\ \frac{l}{|l|} \rangle \quad (5.9)$$

совпадают с проекциями осей симметрии четвертого, второго и третьего порядка, соответственно. Например, нормали $[15\ \bar{3}\ 10]$, согласно (5.9), отвечает ориентационный треугольник $[100] - [101] - [1\ \bar{1}\ 1]$. Нетрудно убедиться, что имеется всего двадцать четыре варианта различных ориентировок, отвечающих нормальям $\langle h\ k\ l \rangle$. Учитывая замечания, сделанные в предыдущем абзаце, видим, что вершина $\langle 0\ 0\ l / |l| \rangle$ ориентационного треугольника, сопоставляемого с габитусом $\{h\ k\ l\}$, указывает направление растяжения аустенита при образовании мартенситного кристалла. Отметим

также, что вершина $\langle h/|h| \quad k/|k| \quad l/|l| \rangle$ треугольника указывает направление нормали к той плотноупакованной плоскости аустенита из совокупности четырех плоскостей $\{111\}$, которая входит в ориентационное соотношение решеток γ - и α - фаз (см. п. 1.2) для конкретного габитуса из семейства $\{h \ k \ l\}$ и имеет наименьший, по сравнению с остальными плоскостями $\{111\}$, угол с плоскостью габитуса. Последнее обстоятельство способствует микроступенчатому сочленению, хорошо известному для границ зерен [194].

5.2 Закономерность группировки кристаллов пакетного мартенсита

Исследование пакетного (реечного) мартенсита потребовало значительных усилий экспериментаторов. Достаточно полную картину, отражающую эволюцию представлений о строении пакетного мартенсита, можно получить из публикаций [24, 195–205]. Габитусы, близкие $\{557\}$, для пакетного мартенсита впервые были установлены в [195] (и подтверждены в [197, 205]) для систем Fe - 0,2% C, Fe - 0,6% C, причем совпадение пары индексов Миллера является лишь приближенным, так что в действительности нормаль к габитусной плоскости оказывается внутри соответствующего габитусу ориентационного треугольника (см. конец п. 5.1.4), а не на границе двух треугольников. В двухволновой схеме, использованной в п. 5.1 для описания габитусов $\{h \ h \ l\} - \{557\} \div \{225\}$, однозначность ориентировки для габитусов вблизи $\{557\}$, $\{225\}$ возникает, если направления $\mathbf{c}_2 \parallel \langle 11\eta \rangle$ „расщепляются“ на пары $\langle 1 \pm \eta_1, 1 \mp \eta_2, \eta \rangle$, $|\eta_{1,2}| < \eta$ и соответственно вместо $\{h \ h \ l\}$ получаем $\{h \pm \delta_1, h \mp \delta_2, l\}$, где $|\delta_{1,2}| < 1$. С помощью (5.3) при $\mathbf{c}_1 \parallel [00\bar{1}]$, $\mathbf{c}_2 \parallel [1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \eta]$ находим вектор \mathbf{N} , коллинеарный нормали к габитусной плоскости,

$$\mathbf{N} \parallel [1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \kappa \sqrt{(1 + \eta_1)^2 + (1 - \eta_2)^2 + \eta^2 + \eta}], \quad (5.10)$$

где $\kappa = c_2 c_1^{-1}$. Тогда, например, при $\eta_1 = \eta_2 = 0,03$, $\eta = -0,21$, $\kappa = 1,2$ из (5.10) получаем габитус (4,79 4,51 7), нормаль к которому лежит в ориентационном треугольнике $[001] - [101] - [111]$.

Если считать, что для инициирования $\gamma - \alpha$ превращения в случае пакетного мартенсита необходимы аналогичные случаю пластинчатого мартенсита (см. п. 5.1.4) фазовые соотношения смещений атомов, вызванных волнами, то кристаллам с габитусами вида $\{5 + \delta_1, 5 - \delta_2, 7\}$ при $\delta_{1,2} > 0$ сопоставляются направления растяжения $\langle 001 \rangle$ и сжатия $\langle 100 \rangle$, где позиции единицы совпадают с позициями индексов габитусной плоскости, модули которых имеют соответственно наибольшее и среднее значения.

Учитывая, однако, близость волновой нормали одной из волн к оси симметрии четвертого порядка $\langle 001 \rangle$, нельзя исключить, что для наибо́льшей реализации деформации Бейна, эта волна несет деформацию сжатия. Тогда квазипродольная волна, бегущая в направлении близком к оси симметрии второго порядка $\langle 110 \rangle$, несет деформацию растяжения. В этом случае, очевидно, для развития деформации Бейна потребуется деформация растяжения и вдоль ортогональной оси $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. Ее появление после потери устойчивости исходной фазы, в конечном итоге, обуславливается электронными корреляциями, восстанавливающими симметрию новой более устойчивой фазы. Значит, правило сопоставления индексов габитусной плоскости осям растяжения и сжатия, установленное для двойникованных кристаллов, в случае $\{5 + \delta_1, 5 - \delta_2, 7\}$ - кристаллов может быть изменено. А именно: позиции наибольшего индекса $\langle 001 \rangle$ следует сопоставлять ориентировку главной оси сжатия, а с парой близких по величине индексов сопоставляется ориентировка оси растяжения близкая к $\langle 110 \rangle$. Окончательный выбор остается за анализом всей совокупности морфологических признаков после перехода от пороговых к финишным деформациям, превышающим пороговые не менее, чем на два порядка. В приближении, заменяющем деформации, порождаемые квазипродольными волнами, чисто продольными деформациями, компонента макросдвига $\Delta \mathbf{S}$, лежащая в плоскости габитуса, параллельна векторной сумме скоростей \mathbf{c}_2 и \mathbf{c}_1 :

$$\Delta \mathbf{S} \parallel \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 \parallel [\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_1]_{\gamma}. \quad (5.11)$$

В дальнейшем вместо записи $\{5 + \delta_1, 5 - \delta_2, 7\}$ будем исполь-

зовать более компактный вариант $\{\tilde{5}57\}$, полагая $5 \leq \tilde{5}$. Значит, для габитусов, близких $\{\tilde{5}57\}$, направление $\Delta\mathbf{S}$ должно лежать в окрестности ориентировок $\langle 7\tilde{7}10 \rangle_\gamma$, где $7 \leq \tilde{7}$. Поскольку мартенсит с такими габитусами имеет наиболее высокие температуры M_S , естественно ожидать, что измерение величины макросдвига будет затруднено из-за релаксационных процессов в аустените. Очевидно, что при релаксации подобные сдвиги могут инициировать, в первую очередь, рождение дислокаций в плоскостях скольжения $\{111\}_\gamma$, составляющих с плоскостью габитуса $\{\tilde{5}57\}_\gamma$ наименьший угол, и с векторами Бюргерса \mathbf{b} , имеющими наименьшие углы с направлениями макросдвига, то есть $\mathbf{b} \parallel \langle 01\bar{1} \rangle_\gamma$. Таким образом, осуществляется отбор одной из двенадцати систем скольжения $\{111\}\langle 110 \rangle$ в ГЦК решетке (см., например, [206]).

Из этого анализа следует, что габитусы $\{\tilde{5}57\}$ естественно группируются в секстеты с близкими индексами $\{hkl\}$ и общей плоскостью скольжения $\{111\}$. Пример группировки дан в табл. 5.2 и 5.3 для общих плоскости скольжения $\{111\}$ и значений $\eta < 0$, но противоположных вариантов деформации вдоль оси симметрии четвертого порядка с ориентацией, соответствующей позиции наибольшего индекса в записи габитусной плоскости (растяжение - для табл. 5.2, сжатие - для табл. 5.3)

Группировка соответствует пакету [196, 198] кристаллов шести ориентировок с общей плоскостью (111) , входящей в ориентационное соотношение. Очевидно, что имеются три аналогичные группы, с кристаллами шести ориентировок в каждой, с другими общими плоскостями из совокупности $\{111\}$. Из табл. 5.2 и 5.3 ясно, что если кристаллы шести ориентировок присутствуют в пакете в равных долях, то область, занятая пакетом, должна испытывать в процессе мартенситного превращения квазиизотропное изменение объема, поскольку направления сжатия (растяжения) соответствуют всем трем вариантам деформации Бейна, а чередование направлений сдвига $\Delta\mathbf{S}$ должно приводить к компенсации суммарной сдвиговой деформации в объеме пакета. Именно на этих закономерностях в первую очередь акцентировалось внимание в [196–198].

Отсутствие строгого определения „пакет кристаллов мартенси-

Таблица 5.2. Направления волн и характеристики пакетного мартенсита (позиции наибольшего индекса габитусной плоскости соответствует ось растяжения)

№г.	Габитус	Направление \mathbf{c}_2	Направление \mathbf{c}_1	Ось сжатия	$\Delta\mathbf{S}$	\mathbf{b}
1	$(\tilde{5}57)$	$[1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \eta]$	$[00\bar{1}]$	$[100]$	$[7\tilde{7}\bar{1}0]$	$[01\bar{1}]$
2	$(5\tilde{5}7)$	$[1 - \eta_1, 1 + \eta_2, \eta]$	$[00\bar{1}]$	$[010]$	$[\tilde{7}7\bar{1}0]$	$[10\bar{1}]$
3	$(7\tilde{5}5)$	$[\eta, 1 + \eta_1, 1 - \eta_2]$	$[\bar{1}00]$	$[010]$	$[\bar{1}07\tilde{7}]$	$[\bar{1}01]$
4	$(75\tilde{5})$	$[\eta, 1 - \eta_1, 1 + \eta_2]$	$[\bar{1}00]$	$[001]$	$[\bar{1}0\tilde{7}7]$	$[\bar{1}10]$
5	$(57\tilde{5})$	$[1 - \eta_1, \eta, 1 + \eta_2]$	$[0\bar{1}0]$	$[001]$	$[\tilde{7}\bar{1}07]$	$[1\bar{1}0]$
6	$(\tilde{5}75)$	$[1 + \eta_1, \eta, 1 - \eta_2]$	$[0\bar{1}0]$	$[100]$	$[7\bar{1}0\tilde{7}]$	$[0\bar{1}1]$

Таблица 5.3. Направления волн и характеристики пакетного мартенсита (позиции наибольшего индекса габитусной плоскости соответствует ось сжатия)

№г.	Габитус	Направление \mathbf{c}_2	Направление \mathbf{c}_1	Ось растяжения	$\Delta\mathbf{S}$	\mathbf{b}
1	$(\tilde{5}57)$	$[1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \eta]$	$[00\bar{1}]$	$\sim [110]$	$[7\tilde{7}\bar{1}0]$	$[01\bar{1}]$
2	$(5\tilde{5}7)$	$[1 - \eta_1, 1 + \eta_2, \eta]$	$[00\bar{1}]$	$\sim [110]$	$[\tilde{7}7\bar{1}0]$	$[10\bar{1}]$
3	$(7\tilde{5}5)$	$[\eta, 1 + \eta_1, 1 - \eta_2]$	$[\bar{1}00]$	$\sim [011]$	$[\bar{1}07\tilde{7}]$	$[\bar{1}01]$
4	$(75\tilde{5})$	$[\eta, 1 - \eta_1, 1 + \eta_2]$	$[\bar{1}00]$	$\sim [011]$	$[\bar{1}0\tilde{7}7]$	$[\bar{1}10]$
5	$(57\tilde{5})$	$[1 - \eta_1, \eta, 1 + \eta_2]$	$[0\bar{1}0]$	$\sim [101]$	$[\tilde{7}\bar{1}07]$	$[1\bar{1}0]$
6	$(\tilde{5}75)$	$[1 + \eta_1, \eta, 1 - \eta_2]$	$[0\bar{1}0]$	$\sim [101]$	$[7\bar{1}0\tilde{7}]$	$[0\bar{1}1]$

та“ явилось, наряду с трудностями методического характера, причиной расхождения в результатах определения числа ориентировок кристаллов, входящих в пакет. Так например, в [199] речь шла об одной-двух, в [205] об одной, а в [196–198] о шести ориентировках. Если определить „пакет“ как совокупность кристаллов мартенсита (с габитусами вблизи $\{557\}$) шести ориентировок с общей плоскостью $\{111\}$, что фактически и сделано в [196–198], то обнаружение меньшего числа ориентировок следует сопоставить с некоторой локальной зоной пакета, которая может содержать меньшее число ориентировок. Существование четырех типов зон в пакете было установлено в [202]. Типу 1, например, отвечают тройки ориентировок - тройки габитусов с номерами 1, 3, 5 либо 2, 4, 6 в табл. 5.2 и 5.3, а типу 4 - одна ориентировка - любая из шести в табл. 5.2 и 5.3. Ясно, что при равных объемных долях кристаллов разных ориентировок в зоне типа 1 возможно квазиизотропное изменение объема и компенсация сдвиговой деформации. Очевидно, что использованное определение пакета неявно предполагает наличие достаточно большого превращающегося объема аустенита, то есть критично к величине объема. Результаты для псевдомонокристаллов [203, 204] согласуются с выводами [196–198]. В [200] для случая сосуществующих пластин с габитусами $\{225\}$ и реек пакет определяется как совокупность „блоков“ из пластин и реек (с каждой пластиной связываются рейки двух двойниковых ориентаций), так что требование присутствия шести ориентировок для кристаллов мартенсита в пакете в этом определении сохраняется. Отметим также, что ассоциация плоскости (111) в табл. 5.2 и 5.3 с плоскостью легкого скольжения коррелирует с представлениями [13] о релаксации напряжений при изотермическом мартенситном превращении путем процессов скольжения в окружающей кристалл мартенсита аустенитной матрице.

5.3 Влияние магнитного состояния аустенита и внешнего магнитного поля на $\gamma - \alpha$ мартенситное превращение

5.3.1 Возможные причины смены габитусных плоскостей

Сопоставив габитусы с парами волн, нетрудно судить о том, какие участки электронного спектра активны при мартенситном превращении. По этому наиболее общему признаку кристаллы с габитусными плоскостями, близкими $\{5\ 5\ 7\}$, $\{2\ 2\ 5\}$, объединяются, так как они связываются с парами волн, распространяющимися вблизи осей симметрии четвертого и второго порядка и, соответственно, с электронными состояниями, локализованными вблизи S-поверхностей: $S_{(001)}$, $S_{(110)}$ (см. гл. 2). В случае же габитуса $(15\ 3\ 10)$, обсуждавшегося в п. 5.1.4, направление \mathbf{c}_2 составляет с осями $[001]$, $[110]$, $[111]$ углы $\theta_1 = 20,3^\circ$, $\theta_2 = 69,8^\circ$, $\theta_3 = 34,7^\circ$, и можно предположить, что с габитусами $\{15\ 3\ 10\}$ сопоставляются только волны, бегущие вблизи осей симметрии четвертого порядка, связанные, в свою очередь, с поверхностями $S_{(001)}$. Следовательно, причины первой смены габитусов $\{5\ 5\ 7\} \rightarrow \{2\ 2\ 5\}$ в системах Fe - C и второй $\{2\ 2\ 5\} \rightarrow \{2\ 5\ 9\}$ в системах Fe - C, $\{557\} \rightarrow \{3\ 10\ 15\}$ - в сплавах Fe - Ni явно различны.

В первом случае смены типов волн, управляющих ростом макропластины мартенсита, не происходит, скорость второй волны \mathbf{c}_2 остается в конусе направлений вблизи $\langle 110 \rangle$, изменяется лишь знак проекции \mathbf{c}_2 на направление $\langle 00\bar{1} \rangle$ распространения первой волны (см. п. 5.1.3). Причинами такого изменения могут служить:

1. Рост отношения скоростей $\varkappa = c_2 c_1^{-1}$ при увеличении концентрации углерода, приводящий при $\varkappa > \varkappa_c$ (см. табл. 5.1) к более благоприятным для деформации Бейна условиям (к меньшим пороговым значениям деформации ε_{th}) в случае изменения знака проекции скорости \mathbf{c}_2 на $\langle 00\bar{1} \rangle$;
2. Появление коротковолновой составляющей смещений, отвечающей за тонкую (двойниковую) структуру макропластины

кристаллов с габитусами $\{225\}$. С динамической точки зрения появление коротковолновых смещений (с половиной длины волны порядка толщины двойника) при более низких температурах (по сравнению с температурами M_S для реечного мартенсита) в принципе возможно, так как уменьшение T должно приводить к снижению затухания фононов, а следовательно, и порогового значения σ_{th} инверсной разности населенностей (см. (3.10) в п. 3.1). Последний аргумент согласуется с общепринятой трактовкой [13], в которой релаксация внутренних напряжений в ходе мартенситного превращения при низких температурах связывается преимущественно с процессом двойникования.

Вторая смена габитусов обусловлена, по-видимому, уменьшением активности электронных состояний, локализованных вблизи поверхностей $S_{\langle 110 \rangle}$ по сравнению с состояниями вблизи $S_{\langle 001 \rangle}$. Относительная пассивность состояний вблизи $S_{\langle 110 \rangle}$ может быть связана с различием величин параметров Γ и $\varepsilon_d - \mu$ для поверхностей $S_{\langle 110 \rangle}$ и $S_{\langle 001 \rangle}$. Напомним, что ε_d - некоторое среднее значение $\bar{\varepsilon}$ энергии состояний d-электронов на S-поверхности, а Γ -затухание s-электронов с энергией $\varepsilon_s \approx \varepsilon_d$. Общей причиной различия значений параметра Γ для разных поверхностей S, как в случае сплавов Fe - Ni, так и Fe - C, может служить анизотропия s-d рассеяния, степень которой меняется с изменением концентрации легирующего элемента. Изменение же $\varepsilon_d - \mu$ для спин-неполяризованных состояний с $\varepsilon_d - \mu > 0$ (см. п. 4.5) вызывается изменением параметра решетки a , причем темп изменения $\varepsilon_d - \mu$ для разных S-поверхностей может различаться из-за несовпадения темпов изменения энергий ε_d . Используя, например, приближение сильной связи [104] с учетом первых и вторых соседей и выражения для матричных элементов $V_{ij} \sim a^{-5}$ междоузельных электронных переходов из [183], нетрудно убедиться, что характерные энергии (см. п. 2.5) ε_{X_5} , ε_{X_2} , ε_{L_3} при росте a убывают, но темп снижения ε_{X_5} наибольший, а ε_{L_3} - наименьший. Для спин-поляризованных состояний значение $\varepsilon_{d\uparrow} - \mu < 0$ зависит, кроме того, и от величины

обменного расщепления, вероятно возрастающего при температурах ниже температуры магнитного упорядочения и являющегося, при анизотропном расщеплении, дополнительной причиной пассивации состояний электронов вблизи $S_{(110)}$ для системы Fe - Ni (при $C_{Ni} > 29\%$), в которой магнитное упорядочение γ -фазы предшествует мартенситному превращению.

Влияние магнитного состояния аустенита на смену кинетики превращения отмечалось в [207] и обсуждалось в [208] в связи с качественным рассмотрением причин избирательного воздействия магнитного поля на протекание $\gamma - \alpha$ превращения. Основная закономерность, установленная при действии импульсных магнитных полей с напряженностью H до $2,8 \cdot 10^7$ А/м (≈ 350 кЭ) на сплавы Fe-Ni заключается, согласно [15], в том, что при содержании никеля больше 25% поле стимулирует атермическое образование пластинчатого мартенсита, приводя к немонотонному повышению точки M_S на ΔM_S , как это изображено на рис. 5.2.

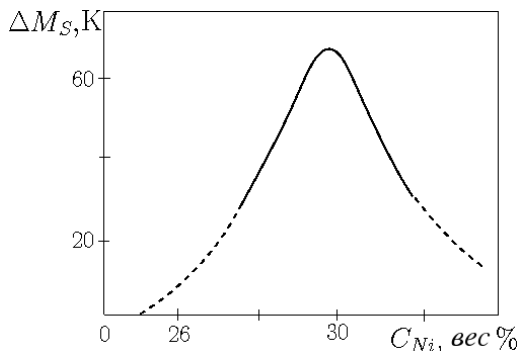


Рис. 5.2. Зависимость смещения мартенситной точки в поле $2,6 \cdot 10^7$ А/м от содержания никеля (вес. %) [15]

Положительный сдвиг $\Delta M_S > 0$ объясняется в [15] большей величиной намагниченности α -фазы и, соответственно, большим снижением свободной энергии α -фазы в магнитном поле по сравнению с γ -фазой. Немонотонный же характер изменения удается объяснить при учете аномально большой объемной магнитострикции парапроцесса [209, 210], нижняя концентрационная граница немонотонно

нотонной зависимости которой совпадает с нижней границей для зависимости ΔM_S (см. рис. 5.3, взятый из [211]).

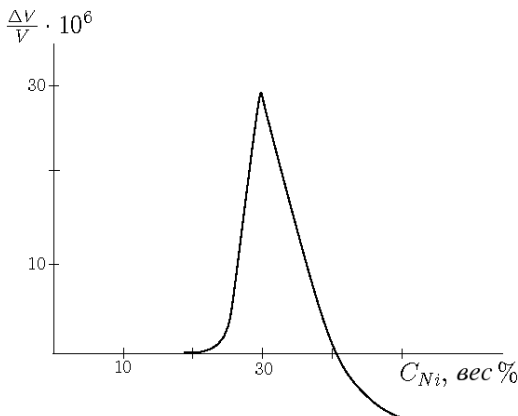


Рис. 5.3. Изменение объема за счет магнитострикции парапроцесса в поле $8,4 \cdot 10^4$ А/м [211] (Ni-вес. %)

Аналогичная корреляция имеет место для сталей с суперпарамагнитной γ -фазой [209, 212] и железо-никель-марганцевых сплавов $Fe_{70+x}Ni_{30-2x}Mn_x$ ($0 < x < 4$), исследованных в [213, 214]. Линейная экстраполяция зависимости относительного изменения объема $\Delta V/V$ от величины H , приведенной на рис. 5.4, взятом из [209], для $H = 2,8 \cdot 10^7$ А/м дает $\Delta V/V \sim 10^{-3}$. Рост удельного объема в магнитном поле коррелирует с нарастанием намагниченности [213]. Это позволяет предположить, что в сильном магнитном поле реализуется „квазиферромагнитное“ упорядочение, с которым и связан переход к атермическому превращению [208]. Причиной возникновения такого состояния является, вероятно, обменное расщепление (индуцированное магнитным полем), обусловленное зависимостью обменного интеграла от межатомного расстояния или удельного объема. Естественной основой для описания подобного эффекта может служить обменно-стрикционная модель (см., например, [215]).

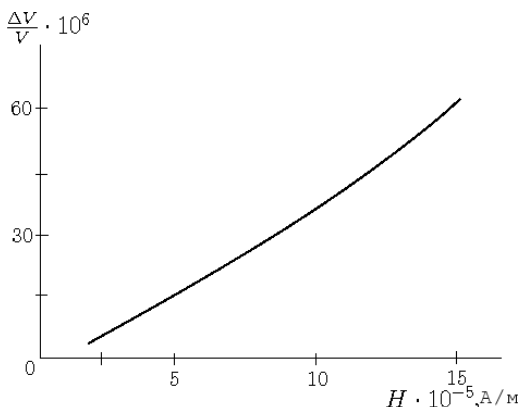


Рис. 5.4. Изменение объема аустенита стали 40Х2Н20 в магнитном поле до $1,5 \cdot 10^6$ А/м при температуре 77 К [209]

5.3.2 Модель с одним пиком плотности электронных состояний. Обменное расщепление и перераспределение электронов

Если уровень Ферми μ немагнитного состояния γ -фазы железоникелевого сплава лежит на границе скачкообразного изменения плотности состояний (непосредственно перед последним пиком плотности состояний d-зоны на рис. 2.9), то процесс обменного расщепления должен сопровождаться перетеканием части s-электронов в d-состояния [216, 217]. Действительно, как видно из сравнения рис. 5.5а и 5.5б для модельной плотности состояний с двумя характерными значениями g_1 и g_2 , обменное расщепление $\Delta\epsilon_{exch}$, приводя для состояний со спином вверх к заполнению состояний с большей плотностью g_2 , должно понижать уровень Ферми, новое положение которого для подсистемы d-электронов μ' (штриховая линия на рис. 5.5б) находится из условия равенства заштрихованных на рис. 5.5б площадей для подзон $d \uparrow$, $d \downarrow$. Учитывая, что разность площадей подзон $d \uparrow$, $d \downarrow$ под уровнем μ' определяет средний атомный магнитный момент $\bar{\mu} \mu_B^{-1}$, выраженный в

магнетонах Бора μ_B , в ферромагнитной фазе получаем

$$\Delta \varepsilon_{exch} = \frac{g_1 + g_2}{g_1 g_2} \frac{\bar{\mu}}{2 \mu_B}, \quad \mu - \mu' = \frac{g_2 - g_1}{g_1 g_2} \frac{\bar{\mu}}{4 \mu_B}. \quad (5.12)$$

Для параболической s-зоны, с монотонно меняющейся плотностью состояний g_s (см. п. 4.3), изменением уровня Ферми $\mu = \mu_s$ подсистемы s-электронов при обменном расщеплении можно пренебречь, то есть рассмотрение s- и d-зон порознь дает $\mu' = \mu_d < \mu_s = \mu$. Требуя выполнения равенства уровней Ферми для d- и s-электронов, легко оценить число перетекающих из s- в d-зону электронов (в пересчете на один атом):

$$\Delta n_s \approx 2 g_s(\mu) (\mu - \mu'), \quad (5.13)$$

где множитель 2 учитывает две проекции спина электрона (напомним, что в п. 4.3 $g_s(\mu)$ - это плотность состояний с одной проекцией спина). При ширине s-зоны $W_s = 10$ эВ и $Z_M \approx 1$ из (4.27) получаем $g_s \approx 0,12 \text{ эВ}^{-1} \text{ атом}^{-1}$. Полагая далее ширину d-зоны $W_d = 4,5$ эВ, ширину прямоугольного пика 0,5 эВ, $g_1 \approx 1 \text{ эВ}^{-1} \text{ атом}^{-1}$, $g_2 \approx 2 \text{ эВ}^{-1} \text{ атом}^{-1}$, $\bar{\mu} \mu_B^{-1} = 1,7$, что, согласно [218], примерно отвечает сплаву $Fe_{0,65}Ni_{0,35}$, находим

$$\Delta \varepsilon_{exch} \approx 1,28 \text{ эВ}, \quad \mu - \mu' \approx 0,21 \text{ эВ}, \quad \Delta n_s \approx 0,05. \quad (5.14)$$

Разумеется, данная оценка имеет иллюстративный характер, показывая лишь порядок величин $\mu - \mu' \sim 0,1$ эВ, $\Delta n_s \sim 10^{-2}$. Значение $\Delta n_s \approx 0,05$ скорее всего завышено, поскольку, во-первых, форма пика плотности состояний и положение уровня Ферми немагнитного состояния, приведенные на рис. 5.5а отвечают максимальному значению Δn_s и, во-вторых, не учитывался относительный сдвиг d- и s-зон. Согласно [111], переход от конфигурации $3d^6 4s^2$ к $3d^7 4s^1$ для γ -фазы железа сопровождается сдвигом d-зоны вверх по энергетической шкале на 5,5 эВ вследствие увеличения потенциальной энергии отталкивания d-электронов. Тогда для сдвига d-зоны вверх, связанного с перетеканием $\Delta n_s = 10^{-2}$ электрона в d-зону, имеем оценку $\Delta \mu' = 5,5 \cdot 10^{-2}$ эВ. Учитывая также, что при

$g_s \approx 0,12 \text{ эВ}^{-1} \text{ атом}^{-1}$ перетекание $\Delta n_s = 10^{-2}$ электрона снижает $\mu = \mu_s$ на $4,2 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$, для тех же g_1 и g_2 получим $\Delta n_s \approx 0,022$, более чем в два раза меньшее по сравнению с первоначальной оценкой (5.14). Соответственно, и снижение уровня Ферми $\mu - \mu'$ оказывается не более $0,11 \text{ эВ}$.

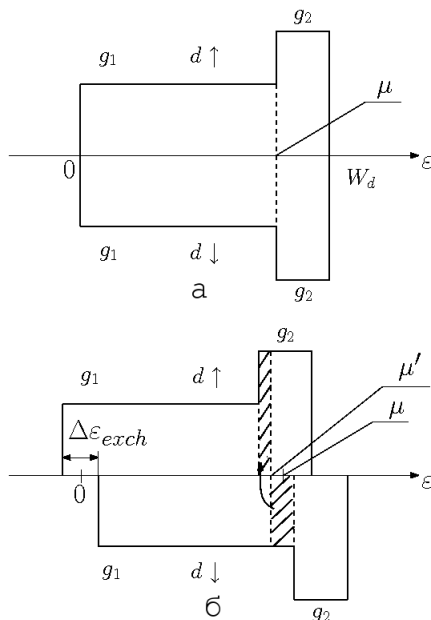


Рис. 5.5. Модель плотности состояний d-электронов в парамагнитной (а) и ферромагнитной (б) фазах

Большой интерес, однако, представляет сдвиг уровня Ферми относительно дна d-зоны. В ферромагнитном состоянии дном d-зоны является дно зоны $d \uparrow$, и сдвиг (в направлении к потолку зоны) обозначим $\Delta \mu_{d\uparrow}$. Величина $\Delta \mu_{d\uparrow}$ находится из равенства площадей заштрихованных на рис. 5.5б прямоугольных участков

$$\Delta \mu_{d\uparrow} = \frac{g_1 \Delta \varepsilon_{exch}}{g_1 + g_2} \approx \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_{exch} \approx 0,43 \text{ эВ}, \quad (5.15)$$

где использовано значение $\Delta \varepsilon_{exch}$ из (5.14). Существенное отличие $\Delta \mu_{d\uparrow}$ от $\mu - \mu'$, слабая зависимость от взаимного сдвига s- и

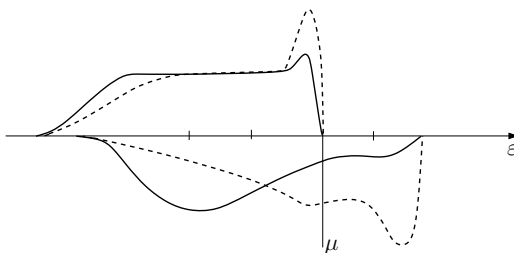


Рис. 5.6. Вклады в плотность состояний от атомов железа (штриховая линия) и никеля (сплошная) для сплава $Fe_{0,6}Ni_{0,4}$ [219]

d-зон (сдвиг $\Delta\mu_{d\uparrow}$ главным образом определяется $d \downarrow \rightarrow d \uparrow$ перераспределением электронов), отсутствие трудностей, связанных с выбором начала отсчета энергии, представляют собой аргументы, позволяющие при сравнении условий измерения параметров $\Delta\mu_{d\uparrow}$ и $\mu - \mu'$ остановиться на первом из них. Очевидно, что для процесса нагрева, сопровождающегося разрушением ферромагнитного порядка, в рассматриваемой модели следует ожидать смещения уровня Ферми к дну d-зоны на ту же величину (5.15), отвечающего обратному $d \uparrow \rightarrow d \downarrow$ ($d \rightarrow s$) перетеканию электронов. Этот вывод согласуется с данными работ [220, 221], в которых методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии установлена зависимость уровня Ферми от температуры для сплавов инварного состава. При нагревании от 100 К до 600 К величина сдвига $\Delta\mu_{d\uparrow}$ к дну d-зоны для сплавов Fe - Ni, содержащих 34,87 ат.% Ni и 35,8 ат.% Ni, составляла приблизительно 0,51 эВ и 0,36 эВ. Учитывая упрощенный характер использованной нами модели, соответствие измеренных значений с оценкой (5.15) выглядит вполне удовлетворительным.

Отметим, что $s \rightarrow d$ перераспределение электронов при магнитном упорядочении должно давать вклад в уменьшение ΔC_l продольного упругого модуля C_l , пропорционального, согласно формуле Бома-Ставера [192], зарядовому числу Z иона, изменение которого ΔZ совпадает с $-\Delta n_s$. Очевидно, что

$$\Delta C_l \approx \frac{\Delta Z}{Z} C_l,$$

и при $\Delta Z \approx -0,02$, $Z \approx 1$ имеем $\Delta C_l \approx -0,02C_l$, что составляет

примерно 10% наблюдаемого [38] уменьшения упругих модулей¹ в процессе магнитного упорядочения.

Число участвующих в $s \rightarrow d$ переходе электронов Δn_s , несмотря на малость значений, может рассматриваться, наряду с $\Delta \mu_{d\uparrow}$, как информативный параметр, благодаря высокой чувствительности к процессу $s \rightarrow d$ перераспределения изомерного сдвига δ линии поглощения ядерного гамма-резонанса, возрастающего при $s \rightarrow d$ и убывающего при $d \rightarrow s$ переходах (см., например, [222]). Используя график зависимости изомерного сдвига Fe^{57} от плотности заряда 3d- и 4s-электронов (рис. 16 в [222]) для конфигурации $3d^{8-z}4s^z$ при $Z \approx 1$, $\Delta Z \approx -\Delta n_s \approx -0,022$ находим, что изомерный сдвиг увеличивается на $\Delta\delta \approx 6,4 \cdot 10^{-5}$ м/с. Данная оценка согласуется с интервалом $\Delta\delta = (0,6 \div 1) \cdot 10^{-4}$ м/с, установленным в [223] для изменения изомерного сдвига в сплавах $Fe - (28 \div 75)\% Ni$ при магнитном фазовом переходе (несколько меньшее $\Delta\delta = (4 \div 5) \cdot 10^{-5}$ м/с наблюдалось в [224] для сплава Fe-33% Ni).

Модели с одним пиком плотности состояний использовались для ГЦК железо-никелевых сплавов неоднократно (см., например, [219, 225, 226]). Кроме выбора более реалистичной (близкой к треугольной) формы пика плотности состояний в них, в приближении когерентного потенциала, показано:

- Различие кривых плотности состояний подзон $d \uparrow$ и $d \downarrow$, хорошо видное и на рис. 2.9;
- Изменение формы подзон (в основном меняется форма зоны $d \downarrow$) при изменении состава сплава;
- Разбиение плотности состояний на парциальные вклады от атомов Fe и Ni. Пример такого разбиения для сплава $Fe_{0,6}Ni_{0,4}$, взятый из [219], приведен на рис. 5.6.

В свете этих исследований относительный успех использованной при оценках простой модели жесткой зоны обусловлен сохранением

¹Основной вклад в смягчение упругих модулей дает перераспределение d-электронов. Так например, при $\bar{\mu} = 1,7\mu_B$ (перетекание 0,85 электрон/атом из состояний с низкой плотностью g_1 в состояния с большей плотностью g_2) получаем $\Delta Z/Z \approx \Delta C/C \approx -0,85/7$.

вида зоны $d \uparrow$ для парциальных составляющих от атомов железа и никеля и слабостью изменения плотности состояний зоны $d \downarrow$ на уровне Ферми при изменении состава сплава. Следует иметь в виду, что рассмотренный механизм изменения изомерного сдвига за счет $s \rightarrow d$ перетекания электронов ограничивается той концентрацией никеля, начиная с которой процесс $d \downarrow \rightarrow d \uparrow$ перераспределения электронов не приводит к снижению уровня Ферми подсистемы d -электронов. Судя по данным [219], эта концентрация близка к 40% Ni, значит, в интересующей нас области концентрации $29 \div 34\%$ Ni процесс $s \rightarrow d$ перетекания может давать основной вклад в $\Delta\delta$.

Нарисованная качественная картина нуждается, как минимум, в одном дополнении, а именно: в силу значительной концентрационной и магнитной неоднородности (см., например, [227, 228]) переход в магнитоупорядоченное состояние носит размытый характер, причем с понижением температуры магнитная структура неоднородности может изменяться от квазипарамагнитной до хаотически замороженного распределения спинов типа „спинового стекла“ [229]. Причиной формирования неколлинеарной магнитной структуры, согласно [230, 231], служит смешанный характер обменного взаимодействия, имеющий место во многих бинарных сплавах переходных металлов. В частности, в сплавах Fe - Ni обменные интегралы для пар атомов Fe - Fe отрицательны $J_{Fe-Fe} < 0$, а для пар Fe - Ni, Ni - Ni положительны $J_{Fe-Ni} > 0$, $J_{Ni-Ni} > 0$. Представление об антиферромагнитном характере Fe - Fe обменного взаимодействия в железе и его сплавах с ГЦК решеткой было впервые введено в [232]. Найденные в [233] значения обменных интегралов $J_{Fe-Fe} = -9$ мэВ, $J_{Fe-Ni} = 39$ мэВ, $J_{Ni-Ni} = 52$ мэВ подтвердили эти представления. Таким образом, аустенит ниже точки Кюри T_c не имеет строго коллинеарной магнитной структуры, и трактовка его состояния как ферромагнитного является приближенной.

В серии нейтронографических исследований атомной и магнитной структуры аустенитных железо-никелевых сплавов инварного состава (см. работы [234–236] и ссылки в них) обнаружены сверхструктуры γ' , γ'' , γ''' , первая из которых реализуется уже в парамагнитной области при $T > T_c > M_S$, вторая - при $T \leq T_c$ ($T >$

M_S) и связана с ферромагнитным упорядочением, а третья - при $T \leq T_N$ (T_N - температура Нееля, $T_N < M_S$) и отражает появление дальнего антиферромагнитного порядка. Отметим, что в [237, 238] γ'' -фаза рассматривалась как промежуточная фаза, обеспечивающая симметричную связь между γ - и α - фазами, приводящую к ориентационному соотношению Нишиямы для решеток γ - и α -фаз.

На сложный характер магнитного перехода указывают и данные работы [239] (см. подробнее [240]), в которой на основе довольно тонкого анализа изменения изомерного сдвига для сплавов Fe - Ni с $(28,5 \div 31,3)$ вес.% Ni выявлены две стадии протекания магнитного превращения в аустените в интервале температур $0,8 \leq T \cdot T_c^{-1} \leq 1$. Первая стадия реализуется в интервале температур до $25 \div 30$ К ниже T_c и характеризуется увеличением изомерного сдвига на ядрах Fe^{57} в ферромагнитных областях ГЦК фазы на величину $(\Delta\delta)_{fm} \approx 5 \cdot 10^{-5}$ м/с при постоянных значениях δ для парамагнитных областей $(\Delta\delta)_{pm} = 0$. На второй стадии изомерный сдвиг уменьшается, причем для парамагнитных областей на несколько большую величину $(\Delta\delta)_{pm} \approx -6 \cdot 10^{-5}$ м/с, чем для ферромагнитных $(\Delta\delta)_{fm} \approx -4,5 \cdot 10^{-5}$. Положительный сдвиг $(\Delta\delta)_{fm}$ на первой стадии удовлетворительно согласуется с оценкой для сдвига $\Delta\delta$ за счет $s \rightarrow d$ перетекания электронов. Попытка же интерпретации в [239, 240] особенностей второй стадии магнитного превращения как следствия возрастания гидростатического давления при образовании в системе бесконечного ферромагнитного кластера приводит к значениям $\Delta\delta$, составляющим не более $(15 \div 20)$ % от наблюдаемых изменений изомерного сдвига. Не исключено, что недостающая (основная) часть наблюдаемого эффекта связана с процессами $d \rightarrow d$ перераспределения электронов между железом и никелем, обусловленного существенным различием спектральных интервалов, в которых парциальные вклады в плотность состояний от атомов железа и никеля максимальны. Так например, из рис. 5.6 ясно, что увеличение обменного расщепления должно привести к уменьшению числа $d \downarrow$ -электронов для железа и их увеличению для никеля. Такое $d \downarrow \rightarrow d \downarrow$ перераспределение электронов между компонентами сплава должно вести к уменьше-

нию изомерного сдвига, поскольку снижение числа d-электронов на атомах железа увеличивает зарядовую плотность s-электронов на ядре [222]. Однако подобные тонкие эффекты, как и возможная поляризация квазипарамагнитных областей с образованием внутреннего либо внешнего (по отношению к ферромагнитным областям) антиферромагнитного порядка, выпадают из нашего описания.

5.3.3 Ориентированный рост кристаллов атермического мартенсита во внешнем магнитном поле

Ориентирующее влияние магнитного поля на расположение мартенситных кристаллов, заключающееся в некотором преимуществе ориентировок кристаллов мартенсита, длинные оси которых направлены вдоль поля, над другими ориентировками, отмечалось в [15, 241]. В [242] вывод об ориентирующем действии поля сделан на основе исследования магнитной анизотропии образца после $\gamma-\alpha$ превращения в магнитном поле. Термодинамический анализ [15] объясняет преимущество малоугловых ориентировок пластин мартенсита в кубических кристаллах, главным образом, минимизацией положительного вклада в термодинамический потенциал магнитной энергии, связанной с собственным магнитным полем, создаваемым спиновыми магнитными моментами электронов ферромагнитной α - фазы. Как известно, эта энергия в случае эллипсоидальной формы образца является квадратичной формой компонент намагниченности, коэффициенты которой пропорциональны компонентам тензора размагничивания. При малоугловой ориентировке собственная магнитная энергия пропорциональна квадрату намагниченности и наименьшему из трех главных значений тензора размагничивания, которое для тонких дисков (пластин) во много раз меньше единицы. Наоборот, для пластинок с большеугловой ориентацией размагничивающий фактор оказывается порядка единицы, и вклад собственной магнитной энергии будет наибольшим. Следует, однако, иметь в виду, что роль полей размагничивания и магнитной анизотропии, не превышающих $8 \cdot 10^5 \text{ А/м} \sim 10^4 \text{ Э}$, как ориентирующих факторов роста мартенситного кристалла,

уменьшается по мере увеличения внешнего магнитного поля и для сильных магнитных полей $H \geq 10^7$ А/м $\sim 10^5$ Э может стать незначительной [210]. В связи с этим в случае сильного магнитного поля ведущими при ориентированном росте мартенсита могут стать факторы, возрастающие при увеличении внешнего магнитного поля, к которым, в частности, относится неравновесная добавка к функции распределения электронов.

Полагая, что атермическое мартенситное превращение связано только с электронными состояниями, локализованными вблизи поверхностей $S_{\langle 001 \rangle}$ (см. п. 5.3.1), рассмотрим влияние магнитного поля \mathbf{H} на неравновесную добавку $f - f^0$ к равновесной функции распределения электронов f^0 . Следуя [243], в линейном по \mathbf{H} приближении имеем

$$f - f^0 = -\Phi' \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}, \quad (5.16)$$

$$\Phi' = (\tau \mathbf{P}, \mathbf{v}) + \frac{e\tau}{c_0 \hbar} (\mathbf{H}, [\mathbf{v}, \vec{\nabla}]) (\tau \mathbf{P}, \mathbf{v}),$$

где e - заряд электрона; τ - время свободного пробега электрона; c_0 - скорость света; $\vec{\nabla}$ - оператор градиента в \mathbf{k} -пространстве, а явный вид вектора \mathbf{P} , включающего градиенты температуры, химического и электрического потенциалов, для дальнейшего не существен.

При аналитическом описании ограничимся вычислением неравновесных добавок к функциям распределения электронов для состояний вблизи приведенного листа 1 поверхности $S_{[001]}$, совпадающего с квадратной гранью зоны Бриллюэна. Тогда при вычислении групповой скорости \mathbf{v} и ее производных можно воспользоваться простейшим законом дисперсии в приближении сильной связи (2.16), хорошо передающим особенность электронного спектра слабо диспергирующей зоны, нумеруемой точкой X_5 , на листе 1 и вблизи него. В частности, на линии $X_5 W$ из (2.16) имеем $\varepsilon = 4\varepsilon_1 = \text{const}$ (слабая дисперсия появится при учете резонансных интегралов перехода со вторыми соседями). Выбирая $\mathbf{H} \parallel [001]$ и считая, что основной вклад в скорость изменения по \mathbf{k} под знаком $\vec{\nabla}_{\mathbf{k}}$ вносит \mathbf{v} , из (2.16) и (5.16) получим

$$\Phi' - (\tau \mathbf{P}, \mathbf{v}) = \frac{2 e \tau^2 \varepsilon_1^2 a^3}{c_0 \hbar^3} H (J_x + J_y + J_z), \quad (5.17)$$

$$J_x = \sin x (\cos x + \cos z) (1 + \cos z \cos y) P_y,$$

$$J_y = -\sin y (\cos y + \cos z) (1 + \cos z \cos x) P_x, \quad (5.18)$$

$$J_z = \sin z \sin x \sin y (\cos x - \cos y) P_z,$$

$$v_x = 2 \varepsilon_1 a \hbar^{-1} \sin x (\cos y + \cos z),$$

$$v_y = 2 \varepsilon_1 a \hbar^{-1} \sin y (\cos x + \cos z), \quad (5.19)$$

$$v_z = 2 \varepsilon_1 a \hbar^{-1} \sin z (\cos x + \cos y).$$

В (5.18), (5.19) вместо обозначений η_1, η_2, η_3 в (2.16) использованы безындexсные обозначения x, y, z . При процессе переброса между состояниями вблизи листов 1 нормальная к листам 1 компонента скорости меняет знак ($v_{x,y,z}$ в (5.19) содержат нечетные функции синус), и разности неравновесных добавок $\sim (\tau \mathbf{P}, \mathbf{v})$ складываются, приводя к максимальной инверсной разности населенностей (ИРН) для пар состояний. Как следует из (5.18), тем же свойством обладают полевые добавки, содержащие J_x, J_y и дающие дополнительный вклад в ИРН соответственно для пар состояний вблизи листов 1 с нормальными $[100]$ и $[010]$. Добавка же $\sim J_z$, нечетная к замене $x \leftrightarrow y$, для пар состояний вблизи листа 1 с нормалью $[001]$ в области симметричной к замене $x \leftrightarrow y$ не дает вклада в ИРН. В привычной терминологии такое поведение полевых добавок отвечает поперечным термо- и гальваномангнитным эффектам. Значит, поле $\mathbf{H} \parallel [001]$ будет стимулировать генерацию волн с \mathbf{q} вблизи $[100]$ и $[010]$. Тогда, в соответствии с двухволновой схемой, следует ожидать габитусов вида $\{\mathbf{l} \mathbf{k} \mathbf{h}\}$, имеющих с \mathbf{H} наименьшие углы ($|\mathbf{l}| > |\mathbf{k}| > |\mathbf{h}|$), где черта под индексом означает фиксацию его позиции: $\{\mathbf{l} \mathbf{k} \mathbf{h}\}$ - $(\mathbf{l} \mathbf{k} \mathbf{h}), (\mathbf{k} \mathbf{l} \mathbf{h}), (\mathbf{k} \mathbf{l} \bar{\mathbf{h}}), (\bar{\mathbf{l}} \mathbf{k} \mathbf{h}), \dots$ Соответственно, $\{\mathbf{h} \mathbf{k} \mathbf{l}\}$ и $\{\mathbf{h} \mathbf{k} \bar{\mathbf{l}}\}$ - совокупности средне- и большеугловых габитусов. При $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$ этот ориентационный эффект должен исчезать. Последнее важно для выяснения причин ориентации, поскольку существуют термодинамические соображения [15] в пользу малоугловой

ориентации первых пластин мартенсита независимо от направления \mathbf{H} . Отсутствие заметной ориентации при $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$ по сравнению с $\mathbf{H} \parallel [001]$ означало бы определяющую роль динамического механизма. Разумеется, влияние \mathbf{H} на генерацию волн смещений решетки проявляется, когда полевая добавка станет сопоставимой с начальной ($\tau \mathbf{P}, \mathbf{v}$). При сравнении удобно усреднить добавки, проинтегрировав (5.17) и (5.18) по плоскостям, параллельным листам 1. Тогда их отношение

$$\psi \approx \frac{e \tau a^2 \varepsilon_1}{5 c_0 \hbar^2} \frac{P_y}{P_x} H. \quad (5.20)$$

При $P_y \approx P_x$, $\tau \sim 10^{-12}$ с, $a = 3,5 \cdot 10^{-10}$ м, $\varepsilon_1 = 5 \cdot 10^{-20}$ Дж (что соответствует ширине зоны $\Delta\varepsilon = 16\varepsilon_1 = 5$ эВ), $H = 8 \cdot 10^6$ А/м $\sim 10^5$ Э - типичных для экспериментов [15], из (5.20) получаем $\psi \approx 0,2$, и значит полевая добавка существенна.

Следует подчеркнуть, что вывод о поперечном характере термо- и гальваномагнитных эффектов при $\mathbf{H} \parallel [001]$, сделанный при рассмотрении электронных состояний вблизи плоских листов 1 поверхностей $S_{(001)}$, сохраняется и при анализе неравновесных добавок для состояний вблизи кривых листов 2 поверхностей $S'_{(001)}$. Чтобы убедиться в этом, достаточно вспомнить определение (2.11) поверхности S и учесть, что в полевой добавке (5.16) вектор $[\mathbf{v}, \vec{\nabla}]$ ортогонален \mathbf{v} , поэтому скалярное произведение $(\mathbf{H}, [\mathbf{v}, \vec{\nabla}])$ обращается в нуль при $\mathbf{v} \parallel \mathbf{H}$ и максимально при $\mathbf{v} \perp \mathbf{H}$. Это означает, что вывод о преимуществе малоугловых ориентаций пластинок мартенсита при $\mathbf{H} \parallel [001]$ может быть сделан и при рассмотрении полевых добавок к функции распределения f для состояний электронов вблизи листов 2 поверхностей $S'_{(001)}$, то есть носит общий характер.

В случае магнитоупорядоченного аустенита вместо \mathbf{H} следует использовать вектор индукции и учитывать магнитострикцию, поскольку возникающие деформации могут модифицировать ориентационный эффект. При $\mathbf{H} \parallel [001]$ и константе магнитострикции $\lambda_{100} < 0$ в направлении $[001]$ возникает сжатие, а в $[100]$, $[010]$ равные растяжения (см. §2, гл. 23 в [159]). Учитывая правило сопостав-

ления индексам габитуса осей растяжения и сжатия, установленное в п. 5.1.4, наряду с малоугловыми $\{l\ k\ \underline{h}\}$ следует ожидать тогда и среднеугловых $\{l\ h\ \underline{k}\}$ габитусов. Интересно, что при \mathbf{H} вблизи [001], обеспечивающем вдоль одной из двух поперечных осей, например вдоль [010], большее растяжение, среди мало- и среднеугловых габитусов наиболее вероятно появление $\{k\ \underline{l}\ \underline{h}\}$ и $\{h\ \underline{l}\ \underline{k}\}$ с двумя фиксированными позициями индексов. При $\lambda_{100} > 0$ (растяжение вдоль [001]) наряду с малоугловыми должны появиться большеугловые $\{h\ k\ \underline{l}\}$ габитусы.

Подчеркнем, что ориентационный эффект во внешнем магнитном поле надежно отделяется от ориентационного эффекта, обусловленного одноосными упругими напряжениями (связанными с магнитострикционным эффектом или внешней нагрузкой), вызывающими появление среднеугловых (при сжатии) или большеугловых (при растяжении) ориентировок пластин атермического мартенсита.

В свою очередь, вклад в ориентационный эффект, связанный с неравновесной полевой добавкой к функции распределения электронов, возрастающий при увеличении \mathbf{H} , можно обнаружить в сильном магнитном поле на фоне статического ориентационного эффекта, обусловленного существованием магнитных полей размагничивания и анизотропии, относительная роль которых при увеличении \mathbf{H} уменьшается.

В работе [244] на монокристаллических образцах сталей 50X2H22, 77X2H22 с малой автокаталитичностью $\gamma - \alpha$ превращения, как в импульсном, так и в постоянном внешнем поле, надежно установлено преобладание малоугловой ориентировки пластинок мартенсита, причем наиболее ярко ориентационный эффект проявляется при \mathbf{H} параллельном осям $\langle 001 \rangle$, что хорошо согласуется с предсказанием, сделанным выше на основе анализа неравновесной полевой добавки. Характерно, что при $\mathbf{H} \parallel [001]$ для стали 50X2H22 увеличение \mathbf{H} от критического значения $\mathbf{H}_c = 1,1 \cdot 10^7$ А/м (\mathbf{H}_c - поле, вызывающее при температуре эксперимента $T_{exp} = 203$ К появление первых порций мартенсита, $T_{exp} - M_S \approx 100$ К) приводит к увеличению ориентационного эффекта. Для стали 77X2H22

(при $T_{exp} = 77$ К критическое поле H_c составляет $\approx 8,76 \cdot 10^6$ А/м) были получены аналогичные результаты. К сожалению, в [244] при $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$ ограничились случаем $\mathbf{H} = \mathbf{H}_c$ и не исследовали зависимость ориентационного эффекта от величины \mathbf{H} . Согласно проведенному выше обсуждению, увеличение \mathbf{H} должно при $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$ сопровождаться уменьшением ориентационного эффекта. В целом же результаты [244] свидетельствуют в пользу выводов, полученных на основе представлений об управлении процессом роста атермического мартенсита продольными волнами, бегущими вблизи направлений $\langle 001 \rangle$ и, соответственно, о ведущей роли электронных состояний, локализованных вблизи поверхностей $S_{\langle 001 \rangle}$.

5.4 Заключение к главе 5

На основе анализа морфологических признаков в рамках двухволновой схемы управления ростом кристалла мартенсита можно сделать следующие выводы.

1. Набор габитусов для систем Fe - Ni, Fe - C описывается двухволновой моделью, в которой одна из волн - продольная, бегущая в направлении $\langle 001 \rangle$, а вторая квазипродольная, определяемая при наличии экспериментальной информации об упругих модулях при температуре M_S .
2. Габитусы, близкие $\{557\}$ и $\{225\}$, описываются парами волн, бегущими вблизи ортогональных осей симметрии второго и четвертого порядков: $\langle 110 \rangle$, $\langle 001 \rangle$. Критерий, разделяющий случаи благоприятные для реализации габитусов $\{557\}$ - $\kappa = c_{\Sigma} c_{\Delta}^{-1} < \kappa_c$ и $\{225\}$ - $\kappa = c_{\Sigma} c_{\Delta}^{-1} > \kappa_c$, позволяет, в принципе, объяснить отсутствие габитуса $\{225\}$ в системах Fe - Ni.
3. Габитусы, близкие $\{259\}$, $\{31015\}$, связаны только с волнами, бегущими вблизи осей симметрии четвертого порядка. Возможными причинами пассивации пар электронных состояний (вблизи поверхностей $S_{\langle 110 \rangle}$), связанных с генерацией волн в направлениях $\langle 110 \rangle$, могут служить анизотропия процессов s - d-рассеяния и различие параметров $\varepsilon_d - \mu$, зависящих как от величины параметра решетки, так и от магнитного состояния аустенита.
4. Рост мартенсита управляется длинноволновыми смещениями, действующими согласованно друг с другом и с коротковолновыми смещениями, обеспечивающими формирование тонкой структуры. В частности, плоскости двойникования $\{110\}$, аналогично габитусным, можно описать как результат движения линии пересечения фронтов пар коротких волн, в том числе пар волн вдоль перпендикулярных направлений $\langle 001 \rangle$. Это конечно не исключает описание превращения в малых областях в схеме стоячих волн, поскольку за время порядка по-

ловины периода колебания длинноволнового смещения, когда реализуются благоприятные для превращения условия, коротковолновые смещения могут совершить многократные осцилляции, что позволяет решетке перестроиться наилучшим образом. Оценку периодов колебаний легко получить, учитывая, что толщины макро- и микро- (двойниковой) пластин должны быть порядка половин длин волн, соответственно, длинно- и коротковолновых смещений.

Разумеется, двухволновой схеме роста управления кристаллом, выделяющей только основную компоненту, не противоречит и возможность возникновения двойниковой компоненты вследствие периодического аккомодационного сброса в ходе превращения накапливаемой энергии упругих искажений.

С другой стороны, длинноволновые смещения, слабо затухающие по сравнению с коротковолновыми, являются эффективными носителями информации о превращении, протекающем в разных точках образца, и поэтому могут играть ведущую роль в процессе формирования ансамблей кристаллов.

5. Знание благоприятных, с точки зрения инициирования мартенситного превращения, фазовых соотношений для смещений атомов, вызываемых волнами, позволяет установить правила сопоставления габитуса (ориентационного треугольника на стереографической проекции) с направлениями сжатия и растяжения деформации Бейна (см. конец п. 5.1.4). С помощью этих правил, в частности, легко указать преимущественную ориентацию кристаллов мартенсита напряжения, возникающего в поле одноосных упругих напряжений при температурах выше M_S .
6. Закономерности, наблюдаемые для кристаллов пакетного мартенсита, согласуются с картиной роста, управляемого парами упруго-пластических волн, причем отклонение от равенства пар индексов Миллера габитусных плоскостей реальных кристаллов, приводящее к однозначной ориентировке мартен-

ситных пластин, связывается с отклонениями направлений распространения волн, бегущих вблизи осей $\langle 110 \rangle$, от плоскостей $\{1\bar{1}0\}$.

7. Новый механизм ориентированного роста кристаллов атермического мартенсита во внешнем магнитном поле, предсказываемый на основе анализа неравновесной полевой добавки к функции распределения электронов, подтверждается экспериментальными исследованиями морфологии ансамблей кристаллов мартенсита, образующихся в ориентированных по отношению к внешнему магнитному полю монокристаллах аустенита.

Сделаем ряд замечаний.

1. Простой формализм, устанавливающий связь габитусной плоскости с заданной парой волн может быть использован при феноменологическом анализе для продольных и поперечных волн независимо от причин их возникновения, будь то генерация в неравновесных условиях, деформация при зарождении фазы или возбуждение внешними источниками. В частности, попытка интерпретации габитусных плоскостей вида $\{h\ h\ l\}$, наблюдаемых при $\beta \rightarrow \gamma', \beta''$ мартенситных превращениях в сплавах на основе меди и золота [245], с включением в двухволновую схему поперечных и квазипоперечных волн принималась в [246].
2. В экспериментальном плане проверка двухволновой схемы описания габитуса на первом этапе должна включать определение параметров κ в точке M_S для пар волн и выбор наиболее предпочтительных из них. Целесообразно, конечно, ограничиться измерениями скоростей звука (для кубического кристалла в направлениях Δ , Σ , Λ), достаточными для определения упругих модулей, что позволяет рассчитать κ для любой пары волн. На втором этапе с помощью пары внешних генераторов гиперзвука ($\nu \sim 10^9 \div 10^{10} \text{ с}^{-1}$) можно

в монокристалле возбудить выбранную пару волн. Это должно увеличить вероятность обнаружения при кристаллографическом исследовании одной (известной заранее) габитусной плоскости. Заметим, что знание направлений распространения и типов волн, реализующих термодинамически относительно устойчивый габитус, делает возможным осуществление подобного эксперимента даже с генераторами малой мощности. С мощными же генераторами можно попытаться получить габитус, несвойственный данной системе в обычных условиях. Например, габитус (225) в системе Fe - Ni. Показательным мог бы стать эксперимент в случае параметра \varkappa , близкого к критическому значению \varkappa_c , в котором при фиксированном направлении \mathbf{c}_1 , допустим $\mathbf{c}_1 \parallel [00\bar{1}]$, варьируя направление \mathbf{c}_2 , можно реализовать случаи, отраженные в табл. 5.4.

Таблица 5.4. Индексы Миллера габитусных плоскостей, формируемых парой волн, в зависимости от направления \mathbf{c}_2 скорости второй волны ($\mathbf{c}_1 \parallel [00\bar{1}]$)

Направление \mathbf{c}_2	η	Габитус
$[1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \eta]$	$- \eta_c \leq \eta < 0$	$(5 + \delta_1, 5 - \delta_2, 7)$
$[1 - \eta_1, 1 + \eta_2, \eta]$		$(5 - \delta_1, 5 + \delta_2, 7)$
$[1 + \eta_1, 1 - \eta_2, \eta]$	$0 < \eta \leq \eta_c $	$(2 + \delta_1, 2 - \delta_2, 5)$
$[1 - \eta_1, 1 + \eta_2, \eta]$		$(2 - \delta_1, 2 + \delta_2, 5)$

Богатые возможности для направленного формирования мартенситной структуры в монокристаллах аустенита открывает комбинированное использование магнитной, гиперзвуковой и традиционной механической обработок. Отметим также перспективность методики с двумя (тремя) источниками ультразвука для направленной кристаллизации из расплава (при охлаждении) и аморфного (при нагреве) состояния, причем интерес представляют методики как с бегущими, так и со стоячими волнами. В последнем случае, например, при двух внешних источниках с ортогональными направлениями излучения волн может быть реализована структура типа шахматной дос-

ки с чередующимися аморфными и кристаллическими областями.

3. Привлекательной чертой двухволновой схемы является то, что она конкретно демонстрирует возможность гибкого поведения динамической системы, которая, несмотря на изменение своих параметров (в нашем случае $\kappa_e(0)$), может поддерживать условия для реализации термодинамически выгодно сопряжения фаз. Например, реализация габитуса (557) при росте параметра $\kappa_e(0)$ достигается увеличением отклонения скорости \mathbf{c}_2 от направления $\langle 110 \rangle$. Поскольку же источником неравновесности является энергия, высвобождающаяся в процессе превращения, реализуются те волны, которые создают наилучшие условия для генерации (для поддержания градиентов температуры и химического потенциала). Таким образом, благодаря наличию обратной связи, система может отслеживать термодинамически выгодную ситуацию, изменяя при необходимости спектр генерируемых волн, в частности, выбирая различные скорости \mathbf{c}_2 из конуса направлений вблизи оси $\langle 110 \rangle$. Очевидно, что такая точка зрения, согласуясь без каких либо противоречий с термодинамическими соображениями, дополняет их картиной динамики превращения.
4. В подходе, связывающем стадию роста мартенсита с генерацией волн неравновесными электронами, картина роста зародыша мартенсита, по-видимому, может быть улучшена солитоноподобным описанием движения границы фаз, так как необходимые для генерации условия (градиенты температуры и химического потенциала) существуют вблизи этой границы.

Основные результаты, относящиеся к интерпретации морфологических признаков мартенсита в волновой схеме, опубликованы в работах [99], [128], [246–248]. Перераспределение электронов при ферромагнитном упорядочении в модели с одним пиком плотности состояний рассмотрено в работах [216, 217], результаты которых использованы в [191].

Глава 6

Волновая модель движения границы кристалла мартенсита

Развиваемая волновая модель роста мартенсита основывается на представлении о стадии роста новой фазы при реконструктивных мартенситных превращениях (МП) как о распространяющемся в волновом режиме деформационном превращении решетки. Как обсуждалось в главе 1, эксперименты свидетельствуют о метастабильной устойчивости решетки исходной γ -фазы в точке M_S . Это означает, что переход в новое структурное состояние при любой степени переохлаждения связан с преодолением энергетического барьера и становится возможным, если уровень деформации ε превышает некоторое пороговое значение $\varepsilon_{th}(M_S)$. В волновой модели $\varepsilon \approx 4u\lambda^{-1}$, где u - амплитуда, а λ - длина волны, и принимается, что $\varepsilon_{th}(M_S) \sim 10^{-3}$.

Перестройка решетки аустенита в условиях глубокого переохлаждения сопровождается выделением тепла и скачкообразным изменением объема. Растущий кристалл мартенсита, начиная с момента зарождения, оказывает тепловое, электрическое и механическое воздействия на межфазную область $B_{\gamma-\alpha}$, вызывая отклонение ее состояния от равновесного. В неравновесных условиях возможно нарастание амплитуды колебаний атомов за счет генерации или селективного усиления электронами волн смещений (мазерный механизм неустойчивости колебаний решетки), обеспечивающих деформацию, близкую к пороговой. Учитывая это, нерав-

новесную область $B_{\gamma-\alpha}$ можно рассматривать как активную среду, способную генерировать или усиливать волны, вызывающие, в свою очередь, ее превращение при $\varepsilon \sim \varepsilon_{th}(M_S)$. Мазерный механизм является, таким образом, механизмом положительной обратной связи, преобразующим часть энергии, освобождающейся в процессе превращения, в энергию волн смещений атомов. Полагая, что эти волны обеспечивают преодоление энергетического барьера, рост кристалла мартенсита можно трактовать как самоподдерживающийся процесс волнового типа, при котором область $B_{\gamma-\alpha}$ движется согласованно с волнами смещений атомов.

6.1 Согласованное распространение волны смещения с волной переключения температуры или химического потенциала

Будем характеризовать смещение атомов в волне, распространяющейся в непревращенной области, вектором \mathbf{u} . Полагая волну продольной и считая длину волны $\lambda = 2\pi/q \gg a$, где a - параметр решетки, q - модуль волнового вектора \mathbf{q} , воспользуемся континуальной моделью кристалла, в рамках которой уравнение движения для смещений \mathbf{u} в системе координат с осью x , коллинеарной \mathbf{u} , можно записать в виде

$$\ddot{u} - c^2 u''_{xx} = \chi c u'_x, \quad (6.1)$$

$$\chi = -\kappa_{\mathbf{q}} \left\{ 1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} \left[1 + \frac{G_e^2 t_\sigma}{\hbar^2 \Gamma_e} (u_x'^2 + q^2 u^2) \right]^{-1} \right\}, \quad (6.2)$$

где c - скорость звука; $\kappa_{\mathbf{q}}$ - затухание волны в отсутствие генерации; t_σ - время формирования инверсной разности населенностей σ_0 ; σ_{th} - пороговая разность населенностей; Γ_e - затухание активных в генерации электронов; G_e - резонансный интеграл перекрытия, определяющий ширину электронной зоны в приближении сильной связи. Уравнение (6.1) можно обосновать, ограничиваясь

при описании генерации одномодовым приближением в случае точного резонанса и адиабатическим приближением, приводящими к уравнению (3.49) для медленно меняющихся амплитуд фононного поля $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+$, $\tilde{b}_{\mathbf{q}}$. В частности, эффективное затухание (6.2) то же, что и в (3.49); для перехода к форме записи (6.2) необходимо лишь подставить явный вид (2.4) матричного элемента W_1 и использовать соотношения

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+ \approx \left[\frac{M N \omega_{\mathbf{q}}}{2 \hbar} \right]^{\frac{1}{2}} \exp [-i(\omega_{\mathbf{q}} t - q x)] \left(\frac{\dot{u}}{i \omega_{\mathbf{q}}} + u \right),$$

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}} \approx \left[\frac{M N \omega_{\mathbf{q}}}{2 \hbar} \right]^{\frac{1}{2}} \exp [i(\omega_{\mathbf{q}} t - q x)] \left(u - \frac{\dot{u}}{i \omega_{\mathbf{q}}} \right),$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \equiv \dot{u} \approx -c u'_x$$

при преобразовании $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^+$, $\tilde{b}_{\mathbf{q}}$ в (3.49).

Уравнение (6.1) можно решить, если конкретизирован вид зависимости от x и t входящих в него параметров. Наиболее существенна зависимость $\sigma_0 = \sigma_0(x, t)$, тогда как зависимость остальных параметров ($c, \kappa_{\mathbf{q}}, \sigma_{th}, t_{\sigma}, \Gamma_e, G_e$) от x и t не является определяющей и при качественном рассмотрении ею можно пренебречь. Согласно (3.23), (3.24), σ_0 зависит от x и t неявно через локальные температуру T , химический потенциал μ , и их градиенты. При стационарном движении границы фаз со скоростью $\mathbf{V} \sim c$ представляется естественным приближенное описание температуры и химического потенциала в виде распространяющихся с той же скоростью уединённых фронтов -волн переключения (см., например, [80, 249]): ширина фронта l волны переключения определяет фактически толщину области $B_{\gamma-\alpha}$, которая характеризуется значительными градиентами ∇T , $\nabla \mu$, обеспечивающими выполнение порогового условия генерации $D_0 \equiv \sigma_0 \sigma_{th}^{-1} - 1 > 0$. Учитывая это, будем полагать, что $\sigma_0 = \sigma_0(x - Vt)$. Поскольку усиление волны смещений возможно только в области $B_{\gamma-\alpha}$, перемещающейся со скоростью V , то согласованное распространение стационарных волн переключения

и волны смещений реализуется лишь при $\mathbf{V} = \mathbf{c}$. Полагая это условие выполненным, будем искать решение уравнения (6.1) в виде

$$u = u(x - ct) \equiv u(\xi). \quad (6.3)$$

Подстановка (6.3) в (6.1) приводит к уравнениям

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \right)^2 + q^2 u^2 - \frac{D_0(\xi)}{\beta_0} = 0, \quad (6.4)$$

где $\beta_0 = \hbar^{-2} G_e^2 t_\sigma \Gamma_e^{-1}$. Первое из уравнений (6.4) имеет тривиальное решение, не согласующееся с предполагаемым пространственно-неоднородным распределением смещений в начальный момент времени. Вещественные решения второго из уравнений (6.4) возможны лишь при $D_0 \geq 0$, то есть в области $B_{\gamma-\alpha}$. Задавая область $B_{\gamma-\alpha}$ неравенствами $-l \leq \xi \leq 0$ и считая, что T и μ внутри $B_{\gamma-\alpha}$ зависят от ξ линейно, используем для D_0 выражение

$$D_0(\xi) = \begin{cases} \text{const}_1 \geq 0, & \xi \in [-l, 0], \\ \text{const}_2 < 0, & \xi \notin [-l, 0]. \end{cases} \quad (6.5)$$

Тогда решение второго из уравнений (6.4) в области $B_{\gamma-\alpha}$ будет иметь вид

$$u(\xi) = \frac{1}{q} \left[\frac{D_0(\xi)}{\beta_0} \right]^{\frac{1}{2}} \sin(q\xi + \varphi). \quad (6.6)$$

Значение фазы φ в (6.6) определяется из дополнительных условий, накладываемых на u в начальный момент времени $t = 0$ на границах отрезка $[-l, 0]$.

Решение (6.6) основывается на требовании равенства скоростей волны смещений и волн переключения T и μ . В связи с этим имеет смысл обсудить ограничения, накладываемые этим требованием на параметры модели. Как известно [80], волна переключения удовлетворяет нелинейному уравнению диффузного типа:

$$\dot{\psi} = F(\psi) + d\psi''_{xx}, \quad (6.7)$$

где d - коэффициент диффузии, ψ - безразмерная переменная вида $\psi = \psi_T = (T - T_\gamma)/(T_\alpha - T_\gamma)$ или $\psi = \psi_\mu = (\mu - \mu_\gamma)/(\mu_\alpha - \mu_\gamma)$, а $F(\psi)$ - нелинейная функция. Полагая, что $F(\psi) \geq 0$ и уравнение $F(\psi) = 0$ имеет только два решения $\psi = 0$, $\psi = 1$, соответствующих значениям ψ в γ - и α -фазах, для скорости V будем иметь [80]:

$$2(dF'_\psi(0))^{\frac{1}{2}} = 2 \left(d \frac{dF}{d\psi} \bigg|_{\psi=0} \right)^{\frac{1}{2}} \equiv V_{\min} \leq V. \quad (6.8)$$

Согласно (6.8), равенство $V = c$ возможно, если $V_{\min} \leq c$. Оценим V_{\min} , полагая, что $V_{\min} \neq 0$. Для этого следует конкретизировать $F(\psi)$. Функцию $F(\psi)$, совместимую с требованиями $F(0) = F(1) = 0$, $F'_\psi(0) \neq 0$, всегда можно представить в виде

$$F = \tau^{-1} \psi (1 - v(\psi)), \quad (6.9)$$

где $v(\psi) = 1$ только при $\psi = 1$ и $v(0) = 0$, τ - постоянная с размерностью времени. Из (6.9) следует, что $F'_\psi(0) = \tau^{-1}$ и $V_{\min} = 2(d/\tau)^{1/2}$

$$V_{\min} = 2 \left(\frac{d_{T,\mu}}{\tau} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.10)$$

В случае температурной волны (Т-волны) коэффициент $d \equiv d_T$ - это коэффициент температуропроводности ($d_T \sim 10^{-5} \text{ м}^2\text{с}^{-1}$ для сплавов на основе железа). В случае волны химического потенциала (μ - волны) коэффициент $d \equiv d_\mu$, согласно (3.46), можно выразить через удельную проводимость σ_γ в виде

$$d_\mu = \frac{2 \sigma_\gamma \mu_\gamma}{3 e^2 n_\gamma}$$

и

$$d_\mu \sim 4 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}.$$

Возвращаясь к требованию $V = V_{\min} = c$, оценим τ из (6.10) при $c = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, что дает $\tau \equiv \tau_T \sim 2 \cdot 10^{-12} \text{ с}$, $\tau \equiv \tau_\mu \sim 6 \cdot 10^{-11} \text{ с}$. Ширина фронта l волны переключения при линейной аппроксимации его профиля выражается через τ и $V_{\min} = c$ в виде $l = A \tau c$, где

A —число, не превышающее нескольких единиц и зависящее от вида выражения $v(\psi)$ в (6.9). Например, при $v(\psi) = \psi$ имеем $A = 4$, согласно [249], и $l = l_T \sim 4 \cdot 10^{-8}$ м, а $l = l_\mu \sim 10^{-6}$ м. Учитывая, что в волновой модели оптимальный размер области, деформируемой волной смещений, совпадает с $\lambda/2$, оцениваем минимальное значение q в (6.6) из соотношения $l \sim \lambda/2 = \pi/q$: $q = q_T \sim 10^{-2} \pi/a$ при $l = l_T$, $q = q_\mu \sim (10^{-4} \div 10^{-3}) \pi/a$ при $l = l_\mu$.

Заметим, что выражение (6.5), использованное при решении уравнения (6.4), предполагает, строго говоря, следующий вид функции ψ :

$$\psi = \theta(-\eta - 1) - \eta [\theta(\eta + 1) - \theta(\eta)], \quad (6.11)$$

$$\eta = \frac{(x - ct)}{l} \equiv \frac{\xi}{l},$$

который реализуется лишь при замене выражения (6.9) для $F(\psi)$ прямоугольным импульсом:

$$F(\psi) = \frac{1}{\tau} \theta(\psi) \theta(1 - \psi). \quad (6.12)$$

В (6.11), (6.12) функция θ - единичная функция Хевисайда:

$$\theta(\psi) = \begin{cases} 1, & \psi > 0, \\ 0, & \psi < 0. \end{cases}$$

Подобная аппроксимация профиля фронта волны и $F(\psi)$ является вполне достаточной при качественном рассмотрении, после того как установлена скорость распространения волны переключения.

6.2 Согласованное распространение пары волн смещений с $T(\mu)$ - волной переключения

Обобщим результаты п. 6.1 на случай пары продольных волн, распространяющихся со скоростями \mathbf{c}_1 и \mathbf{c}_2 в неколлинеарных направлениях x_1 и x_2 , полагая, как и в главе 5, что формирование пластины мартенсита толщиной $\sim \lambda_1/2, \sim \lambda_2/2$, где $\lambda_{1,2}$ - длины

волн, происходит за счет присоединения областей, испытывающих синхронное растяжение и сжатие соответственно в x_1 - и x_2 - направлениях. Если исходить первоначально из представления о паре волн типа (6.6) с неограниченными плоскими фронтами, то легко видеть, что областью, в которой может обеспечиваться необходимая для превращения комбинация растяжения и сжатия (а значит, и выделение энергии превращения), является область наложения волн, движущаяся в том же направлении и с той же скоростью $\mathbf{c} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$, что и линия пересечения фронтов. Следовательно, в двухволновой схеме стационарному случаю должна отвечать область $B_{\gamma-\alpha}$, ограниченная как в x_1 -, так и в x_2 - направлениях и перемещающаяся со скоростью \mathbf{c} . Другими словами, стационарное распространение пары волн смещений совместно с волной переключения оказывается возможным, если последняя имеет скорость $\mathbf{V} = \mathbf{c} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$, то есть требование $\mathbf{V} = \mathbf{c}$ в случае одной волны смещений заменяется требованиями $V_{x1} = c_1$, $V_{x2} = c_2$. Для последующих рассуждений фактическая ориентация направлений x_1 и x_2 не имеет принципиального значения, поэтому возьмем их ортогональными. Учитывая (6.6), выражение для смещений u_i , где $i = x_1, x_2$ можно записать в виде

$$u_i = \frac{1}{q_i} \left[\frac{D_{0i}}{\beta_{0i}} \right]^{\frac{1}{2}} \sin (q_i \xi_i + \varphi_i). \quad (6.13)$$

где, однако, D_{0i} зависит уже от двух переменных $\xi_1 = x_1 - c_1 t$ и $\xi_2 = x_2 - c_2 t$, поскольку область $B_{\gamma-\alpha}$, в которой $D_{0i} > 0$, перемещается, как в x_1 -, так и в x_2 - направлениях, и по обоим направлениям имеет ограниченные размеры $\sim l_1, l_2$. Это означает, что каждое из выражений (6.13) описывает стационарный волновой пучок, движущийся совместно с волной переключения. Простейшую модель волны переключения (рис. 6.1), соответствующую волновым пуч-

кам (6.13), можно задать выражением

$$\begin{aligned}
 \psi = & \left[1 + \frac{c_2}{c_1} \eta_2 \right] \left[\theta \left(\eta_2 + \frac{c_1}{c_2} \right) - \theta(\eta_2) \right] \theta \left(-\eta_1 - \frac{c_2}{c_1} \eta_2 - 1 \right) + \\
 & + \left[1 - \frac{c_2}{c_1} \eta_2 \right] \left[\theta(\eta_2) - \theta \left(\eta_2 - \frac{c_2}{c_1} \right) \right] \theta \left(-\eta_1 + \frac{c_1}{c_2} \eta_2 - 1 \right) - \\
 & - \eta_1 [\theta(\eta_1 + 1) - \theta(\eta_1)] \left[\theta \left(\eta_1 + \frac{c_2}{c_1} \eta_2 + 1 \right) - \right. \\
 & \left. - \theta \left(-\eta_1 + \frac{c_1}{c_2} \eta_2 - 1 \right) \right], \tag{6.14}
 \end{aligned}$$

$$\eta_1 = (c_1 \xi_1 + c_2 \xi_2) \tilde{d}^{-1}, \quad \eta_2 = (c_2 \xi_1 - c_1 \xi_2) \tilde{d}^{-1},$$

где $\tilde{d} = c_1 l_1 + c_2 l_2$; координатные оси η_1, η_2 взаимно ортогональны и лежат в плоскости ξ_1 и ξ_2 , причем ось η_1 направлена вдоль \mathbf{V} . Учитывая определение θ -функции Хевисайда, нетрудно понять, что первая строка формулы (6.14) описывает распределение приведенных температур (химических потенциалов) ψ в области $OA_3A_1A'_1$, вторая строка - в области $OA_3A_2A'_2$, а третья - в области $A_1O_1A_2A_3$ на рис. 6.1, то есть (6.14) разбита на слагаемые, отвечающие плоским участкам трехскатной поверхности ψ .

Крайние точки плоскости (x_1, x_2) , достигаемые волной переключения к моменту времени t , - это точки отрезка A_1A_2 прямой $\eta_1 = 0$ (см. рис. 6.1), на котором $\psi = \text{const} = 0$, и который, следовательно, принадлежит фронту волны переключения (в направлении, ортогональном к x_1 и x_2 , фронт является неограниченным). Скорость перемещения точек отрезка A_1A_2 в системе координат x_1, x_2 нетрудно найти, замечая, что для любой точки отрезка A_1A_2 выполняются условия $\dot{\eta}_1 = 0, \dot{\eta}_2 = 0$, из которых следует, что скорость $\dot{\mathbf{r}}$ фронта волны в системе координат x_1, x_2 равна $\mathbf{V} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$. Легко видеть, что при $\dot{\eta}_2 \rightarrow \pm 0$ выражение (6.14) переходит в (6.10). Тогда, считая, что $V = (c_1^2 + c_2^2)^{1/2}$ совпадает с минимальной скоростью $2(d\tau^{-1})^{1/2}$ волны переключения, и учитывая следующее из (6.7), (6.10), (6.11) соотношение $\dot{\psi} = \psi'_{\eta_1} \dot{\eta}_1 = -\dot{\eta}_1 = \tau^{-1}$, где

$\dot{\eta}_1 = -c^2/\tilde{d}$, можно установить выражения для времени τ и коэффициента диффузии d :

$$\tau = \frac{\tilde{d}}{V^2}, \quad d = \frac{1}{4} V^2 \tau = \frac{1}{4} \tilde{d}. \quad (6.15)$$

При заданном \tilde{d} соотношение (6.15) устанавливает связь между l_1 и l_2 , а значит, и длинами волн смещений, распространяющихся в x_1 - и x_2 -направлениях, поскольку $l_1 \sim \lambda_1 \sim q_1^{-1}$ и $l_2 \sim \lambda_2 \sim q_2^{-1}$.

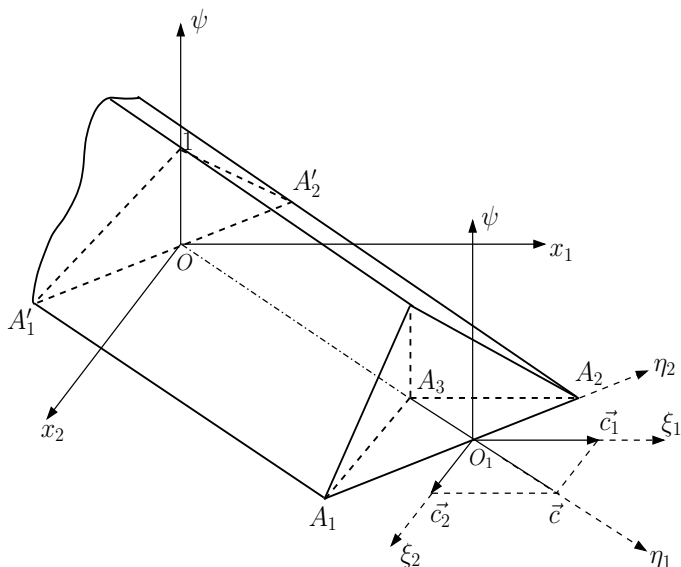


Рис. 6.1. Модель волны переключения, распространяющейся совместно с двумя волновыми пучками. Координаты точек: A_1 - $(\eta_1 = 0, \eta_2 = -c_1/c_2)$, A_2 - $(\eta_1 = 0, \eta_2 = c_2/c_1)$, A_3 - $(\eta_1 = -1, \eta_2 = 0)$; остальные пояснения даны в тексте

Заметим, наконец, что описание T и μ в виде уединенного фронта, разделяющего области с различными стационарными значениями T и μ , является приближенным, так как процессы диффузии в поперечном к \mathbf{V} направлении изменяют профиль двумерной волны с течением времени. Поэтому реальный профиль T - и μ -волн будет иметь вид, близкий к стационарному, лишь вблизи области $B_{\gamma-\alpha}$.

6.3 Стационарная волна относительной объемной деформации $\tilde{\varepsilon}$ при $\gamma - \alpha$ превращении

6.3.1 Триггерная $\tilde{\varepsilon}$ -волна переключения при отсутствии волн смещений

Волны смещений, генерируемые в области $B_{\gamma-\alpha}$, обеспечивают деформацию, необходимую для кооперативного преодоления энергетического барьера, разделяющего α - и γ - структурные состояния, характеризующиеся различными значениями статической деформации. Однако, до сих пор этот факт явно не учитывался, состояния α - и γ -фаз различались по значениям T , μ . Акцентируя далее внимание на статических деформациях, будем учитывать только относительное изменение объема в ходе превращения и характеризовать состояния γ - и α -фаз значениями относительной объемной деформации $\tilde{\varepsilon}$, полагая $\tilde{\varepsilon}_\gamma = 0$ и $\tilde{\varepsilon}_\alpha = 2,4 \cdot 10^{-2}$ - значение объемного эффекта, типичное для деформации Бейна (см. п. 1.4). Знак тильда (\sim) над ε введен для отличия относительной объемной деформации $\tilde{\varepsilon}$ от линейной ε , вызываемой одной волной смещений.

В системе с двумя устойчивыми состояниями ($\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\alpha$, $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\gamma$), разделенными барьером, возможно, как известно [80, 250], распространение триггерной волны переключения (ТВП), для возбуждения которой необходимо начальное возмущение ($\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_0$), превышающее пороговое значение ($\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_{th}$). Известно также, что $\tilde{\varepsilon}$ - волна триггерного типа, распространяющаяся в x -направлении, удовлетворяет уравнению

$$\dot{\tilde{\varepsilon}} = d_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\varepsilon}''_{xx} + F(\tilde{\varepsilon}), \quad (6.16)$$

в котором, в отличие от (6.7), нелинейная функция $F(\tilde{\varepsilon})$ обращается в нуль при $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\gamma = 0$, $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_{th} > 0$, $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\alpha > \tilde{\varepsilon}_{th}$. Простейшее выражение для $F(\tilde{\varepsilon})$ можно взять в виде

$$F(\tilde{\varepsilon}) = -\frac{1}{\tau_{\tilde{\varepsilon}}} \tilde{\varepsilon} (\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}_{th}) (\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}_\alpha), \quad (6.17)$$

где $\tau_{\tilde{\varepsilon}}$ - постоянная с размерностью времени. Стационарное волновое решение $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}(x - V_{\tilde{\varepsilon}} t) \equiv \tilde{\varepsilon}(\xi)$ уравнения (6.16) с нелинейностью (6.17) имеет вид

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{2} \tilde{\varepsilon}_\alpha [1 - \tanh(2 \xi l_\varepsilon^{-1})], \quad (6.18)$$

$$l_\varepsilon = \frac{4}{\tilde{\varepsilon}_\alpha} (2 d_\varepsilon \tau_\varepsilon)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.19)$$

В отличие от T и μ -волн, так называемых [250] фазовых волн переключения (ФВП), обладающих континуумом скоростей $V \geq V_{\min}$, ТВП имеет единственную скорость

$$V_\varepsilon = \left[\frac{d_\varepsilon}{2 \tau_\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} (\tilde{\varepsilon}_\alpha - 2 \tilde{\varepsilon}_{th}). \quad (6.20)$$

Для интерпретации этих результатов заметим, что уравнение (6.16) можно представить в виде уравнения Ландау-Халатникова (см., например, [251]):

$$\dot{\tilde{\varepsilon}} = -\Gamma \frac{\delta \Phi}{\delta \tilde{\varepsilon}},$$

где Γ - кинетический коэффициент (не путать с затуханием электронов); Φ - зависящая от $\tilde{\varepsilon}$ часть свободной энергии; $\delta \Phi / \delta \tilde{\varepsilon}$ - функциональная производная Φ по $\tilde{\varepsilon}$,

$$\Phi = \int dV \left\{ \frac{A}{2} \tilde{\varepsilon}^2 + \frac{1}{3} B \tilde{\varepsilon}^3 + \frac{1}{4} G \tilde{\varepsilon}^4 + \frac{1}{2} P \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x} \right)^2 \right\}, \quad (6.21)$$

где $A/G = \varepsilon_{th} \tilde{\varepsilon}_\alpha$, $B/G = -(\tilde{\varepsilon}_\alpha + \tilde{\varepsilon}_{th})$, $\Gamma G = \tau_\varepsilon^{-1}$, $\Gamma P = d_\varepsilon$. Модель (6.21) для Φ соответствует фазовому переходу первого рода, так как $A > 0$, $B < 0$, $G > 0$. Если, кроме того, $dB/dT < dA/dT < 0$, то при охлаждении упругие модули имеют нормальную температурную зависимость, $\tilde{\varepsilon}_{th}$ и высота энергетического барьера $\Phi_0(\tilde{\varepsilon}_{th})$, разделяющего состояния $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\gamma$, $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_\alpha$, снижаются, оставаясь конечными. Принимая обозначение Φ_0 для Φ при $\partial \tilde{\varepsilon} / \partial x = 0$ и учитывая, что

$$\Phi_0(\tilde{\varepsilon}_\gamma) = 0, \quad \Phi_0(\tilde{\varepsilon}_\alpha) = \frac{V A \tilde{\varepsilon}_\alpha^2 (2 \tilde{\varepsilon}_{th} - \tilde{\varepsilon}_\alpha)}{12 \tilde{\varepsilon}_{th}}, \quad (6.22)$$

$$\Phi_0(\tilde{\varepsilon}_{th}) = \frac{V A \tilde{\varepsilon}_{th}^2 (2 \tilde{\varepsilon}_\alpha - \tilde{\varepsilon}_{th})}{12 \tilde{\varepsilon}_\alpha},$$

где V - объем системы, из (6.20) и (6.22) легко видеть, что $V_{\tilde{\varepsilon}} \sim (\Phi_0(\tilde{\varepsilon}_\gamma) - \Phi_0(\tilde{\varepsilon}_\alpha))$, то есть пропорциональна движущей силе превращения, и $V_{\tilde{\varepsilon}} = 0$ при температуре $T = T_0$, которой отвечает значение $\tilde{\varepsilon}_{th} = 1/2 \tilde{\varepsilon}_\alpha$. Отметим, однако, что для возбуждения ТВП, движущейся с ненулевой скоростью $V_{\tilde{\varepsilon}}$ при T , близких к T_0 , требуются большие $\sim 1/2 \tilde{\varepsilon}_\alpha$ начальные значения $\tilde{\varepsilon}_0$.

Ширина $l_{\tilde{\varepsilon}}$ фронта ТВП (при линейной аппроксимации его профиля), определяемая (6.19), выражается через параметры A и P функционала (6.21) в виде

$$l_{\tilde{\varepsilon}} = 4 \left[\frac{2 \tilde{\varepsilon}_{th} P}{A \tilde{\varepsilon}_\alpha} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.23)$$

Для оценок $l_{\tilde{\varepsilon}}$ предварительно выразим P через удельную поверхностную энергию E_s и A , полагая

$$E_s = \int_{-\infty}^{\infty} dx P \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x} \right)^2. \quad (6.24)$$

Подстановка (6.18) в (6.24) с учетом (6.23) дает

$$E_s = \frac{1}{6} \left[\frac{\tilde{\varepsilon}_\alpha P A}{2 \tilde{\varepsilon}_{th}} \right]^{\frac{1}{2}} \tilde{\varepsilon}_\alpha^2, \quad (6.25)$$

то есть

$$P = 72 E_s^2 \frac{\tilde{\varepsilon}_{th}}{A \tilde{\varepsilon}_\alpha^5}.$$

Используя (6.22), выразим $\tilde{\varepsilon}_{th}$ в виде

$$\tilde{\varepsilon}_{th} = A \tilde{\varepsilon}_\alpha^3 \left[2 A \tilde{\varepsilon}_\alpha^2 - 12 \left(\frac{\Delta \Phi_0}{V} \right) \right]^{-1}. \quad (6.26)$$

В соответствии с результатами расчетов [58] для $\gamma - \alpha$ превращения в сплавах на основе железа можно принять $\Delta \Phi_0(M_S)/V \approx (4/3) Q$, где Q - удельный тепловой эффект (предполагается, что четвертая часть от $\Delta \Phi_0/V$ идет на образование поверхности раздела фаз, чем и объясняется множитель $(4/3)$ при Q). Для сплава Н30, например,

$Q \approx 3 \cdot 10^8$ Дж м⁻³ [22]. Тогда при $A \approx 2 \cdot 10^{11}$ Дж м⁻³- типичное значение модуля сжатия - из (6.26) получим $\tilde{\varepsilon}_{th} \approx 5,4 \cdot 10^{-4}$. Используя для E_s значение 0,2 Дж м⁻² [252], из (6.25) и (6.23) находим $P \approx 10^{-6}$ Дж м⁻¹, $l_{\tilde{\varepsilon}} \approx 1,9 \cdot 10^{-9}$ м $\approx 5a$, то есть ширина фронта $l_{\tilde{\varepsilon}}$ в пять раз превышает параметр решетки γ -фазы.

Сделаем ряд замечаний:

1. Данные [252] относятся к поверхностной энергии неподвижной границы раздела фаз, тогда как выше при расчете E_s использовано решение (6.18) для движущейся границы, что оправдано, строго говоря, лишь в случае температуры, близкой к T_0 , когда $V_{\tilde{\varepsilon}} \approx 0$.

При произвольной температуре значение E_s неподвижной межфазной границы можно найти, следуя схеме расчета энергии доменной границы ферромагнетика [71]:

$$E_s = \left(\frac{PA}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\varepsilon_{\alpha}^2}{27n^2} \left\{ 6 \sqrt{2(n-1)} (n^2 - n + 1) - \sqrt{3(n-2)}(n-2)(n-1) + \frac{2}{\sqrt{n}}(2n-1)(n-2)(n+1) \times \right. \\ \left. \times \ln \left| \frac{2(2n-1) + 3\sqrt{2n(n-1)}}{n-2 + \sqrt{3n(n-2)}} \right| \right\}, \quad (6.27)$$

где $n = \tilde{\varepsilon}_{\alpha}/\tilde{\varepsilon}_{th}$. Сравнение (6.27) с (6.25) показывает, что при $T = T_0$, $\tilde{\varepsilon}_{\alpha} = 2 \tilde{\varepsilon}_{th}$, $n = 2$ выражения для E_s совпадают, как и должно быть. При $T = M_S$, когда $n \gg 1$, из (6.27) имеем

$$E_s \approx \frac{(PAn)^{\frac{1}{2}}}{27\sqrt{2}} \tilde{\varepsilon}_{\alpha}^2 \left\{ 6\sqrt{2} - \sqrt{3} + \right. \\ \left. + 4 \ln \left| \frac{4 + 3\sqrt{2}}{\sqrt{3} + 1} \right| \right\} \approx 0,3 (PAn)^{\frac{1}{2}} \tilde{\varepsilon}_{\alpha}^2, \quad (6.28)$$

приблизительно в 2,5 раза превышающую (6.25). Тогда при $E_s \approx 0,2$ Дж м⁻² получаем $P \approx 4 \cdot 10^{-7}$ Дж м⁻¹ и $l_{\tilde{\varepsilon}} \approx 2a$.

2. В работах [17, 19] при оценке E_s использовалось соотношение

$$E_s \approx \frac{\Phi_0(\tilde{\varepsilon}_{th})}{V} l_{\tilde{\varepsilon}},$$

которое с учетом (6.22), (6.23) записывается в виде

$$E_s \approx \frac{1}{3} \left(\frac{P A \tilde{\varepsilon}_{th}}{\tilde{\varepsilon}_\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{\tilde{\varepsilon}_{th}}{\tilde{\varepsilon}_\alpha} \right) \tilde{\varepsilon}_{th}^2, \quad (6.29)$$

При $T = T_0$, $\tilde{\varepsilon}_\alpha = 2 \tilde{\varepsilon}_{th}$ формула (6.29) правильно передает порядок величины E_s , однако при $T = M_S$ и $\tilde{\varepsilon}_\alpha \geq 10 \tilde{\varepsilon}_{th}$ отношение E_s , найденной из (6.25) или (6.27), к E_s , найденной из (6.29), оказывается порядка $(\tilde{\varepsilon}_\alpha/2 \tilde{\varepsilon}_{th})^3 \geq 10^4$, то есть оценка (6.29) в принципе неприменима.

3. Если движение границы раздела фаз представляет собой термоактивируемый процесс, например, контролируемый процессом диффузии, то $V_{\tilde{\varepsilon}}$, а значит, и Γ , $d_{\tilde{\varepsilon}}$ и $\tau_{\tilde{\varepsilon}}$ могут иметь сильную (экспоненциальную) зависимость от температуры.
4. В модели (6.21) потенциала Φ , при известных A , $\tilde{\varepsilon}_\alpha$, $\tilde{\varepsilon}_{th}$, P , для отыскания Γ , $d_{\tilde{\varepsilon}}$, $\tau_{\tilde{\varepsilon}}$ достаточно знать экспериментальное значение $V_{\tilde{\varepsilon}}$. Действительно, используя соотношения, приведенные вслед за формулой (6.21), запишем $V_{\tilde{\varepsilon}}$ в виде:

$$V_{\tilde{\varepsilon}} = \Gamma \left[\frac{P A}{2 \tilde{\varepsilon}_{th} \tilde{\varepsilon}_\alpha} \right]^{\frac{1}{2}} (\tilde{\varepsilon}_\alpha - 2 \tilde{\varepsilon}_{th}), \quad (6.30)$$

подчеркивающим пропорциональность между $V_{\tilde{\varepsilon}}$ и Γ .

5. Наряду с потенциалом (6.21), часто используется потенциал, содержащий только четные степени $\tilde{\varepsilon}^2$, $\tilde{\varepsilon}^4$, $\tilde{\varepsilon}^6$. Для этого случая, в качественном отношении аналогичного (6.21), рассмотрение триггерной волны переключения легко провести, используя результаты работы [253].

6.3.2 Влияние волн смещения на скорость $\tilde{\varepsilon}$ - волны переключения

Зависимость скорости $V_{\tilde{\varepsilon}}$ от температуры через значения входящих в (6.20) параметров не типична для $\gamma - \alpha$ превращения мартенситного типа. В этом нет ничего удивительного, поскольку ни в уравнении (6.16), ни в функционале (6.21) явным образом не отражен механизм, ответственный за кооперативный характер превращения. В двухволновой модели кооперативность перестройки решетки связывается с волнами смещений, обеспечивающими в процессе распространения пороговый уровень деформации в области $B_{\gamma-\alpha}$, превышение которого приводит к необратимому нарастанию деформации вплоть до значений $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_{\alpha}$ и, как следствие этого, развитию $\tilde{\varepsilon}$ - волны. Ясно, что такая картина роста мартенситного кристалла предполагает движение $\tilde{\varepsilon}$ -волны в направлении x со скоростью \mathbf{c} , равной геометрической сумме скоростей волн смещений. Это становится возможным, если, в результате взаимодействия $\tilde{\varepsilon}$ - ТВП и волн смещений, $\tilde{\varepsilon}$ - ТВП модифицируется в волну, обладающую не единственной скоростью $V_{\tilde{\varepsilon}}$ а, подобно ФВП, континуумом скоростей. Действие волн смещений математически отражается в том, что в точках области $B_{\gamma-\alpha}$ последовательно происходит сближение, слияние и, наконец, исчезновение (так называемая „катастрофа“ складки [254]) двух особых точек $\tilde{\varepsilon}_{\gamma}$ и $\tilde{\varepsilon}_t$, в результате чего остается одна единственная устойчивая особая точка $\tilde{\varepsilon}_{\alpha}$, к которой и стремится система (см. рис. 6.2).

В последнем случае $\tilde{\varepsilon}$ - волна может двигаться, вообще говоря, с любой скоростью, так как область, деформированная волнами смещений, оказывается неустойчивой по отношению к любой положительной флуктуации. Поскольку процесс исчезновения особых точек, обусловленный действием волн смещений, распространяется в пространстве со скоростью \mathbf{c} , то именно она будет единственной выделенной в континууме скоростей модифицированной $\tilde{\varepsilon}$ - волны. Исчезновение особых точек $\tilde{\varepsilon}_{\gamma}$ и $\tilde{\varepsilon}_{th}$ у функции $F(\tilde{\varepsilon})$ можно учесть, включая в (6.21) дополнительное слагаемое „полевого“ типа: $-\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_u)\tilde{\varepsilon}$, где $\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_u)$ - давление, а $\tilde{\varepsilon}_u$ - объ-

емная деформация, связанные с волнами смещений. Полагая затем $\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_u) = K\tilde{\varepsilon}_u$, где $K > 0$, и отождествляя условие слияния $\tilde{\varepsilon}_\gamma$, $\tilde{\varepsilon}_{th} \rightarrow \tilde{\varepsilon}'_\gamma = \tilde{\varepsilon}'_{th} \approx \tilde{\varepsilon}_{th}/2$ особых точек $\tilde{\varepsilon}_\gamma$ и $\tilde{\varepsilon}_{th}$ с условием $\tilde{\varepsilon}_u = \tilde{\varepsilon}'_\gamma$, найдем $K = A/2$. Следовательно, в рамках рассматриваемой модели $\tilde{\varepsilon}_{th}(M_S) = \tilde{\varepsilon}'_\gamma \approx \tilde{\varepsilon}_{th}/2$.

Таким образом, учет волн смещений, обеспечивающих кооперативность превращения на стадии роста, приводит к картине движения границы мартенситного кристалла со скоростью \mathbf{c} , слабо зависящей от T и по порядку величины совпадающей со скоростью звука. Более того, скорость \mathbf{c} будучи геометрической суммой неколлинеарных скоростей \mathbf{c}_1 , \mathbf{c}_2 , может по величине и превосходить скорость звука в направлении \mathbf{c} . Напомним, что сверхзвуковая скорость роста наблюдалась при прохождении волны детонации через сталь [30, 31].

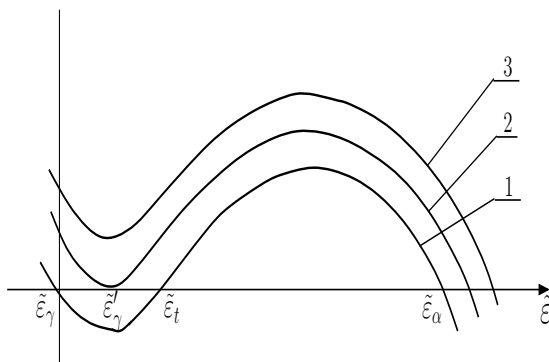


Рис. 6.2. Возникновение „катастрофы“ типа складки: кривая 1 — график функции (6.17) при отсутствии волн смещений; кривые 2 и 3 относятся, соответственно, к слиянию и исчезновению особых точек $\tilde{\varepsilon}_\gamma$, $\tilde{\varepsilon}_{th}$

6.3.3 Профиль модифицированной $\tilde{\varepsilon}$ -волны переключения

Рассмотрим несколько подробнее модифицированную $\tilde{\varepsilon}$ -волну переключения в случае слияния особых точек $\tilde{\varepsilon}_\gamma$, $\tilde{\varepsilon}_{th}$ (кривая 2 на рис.

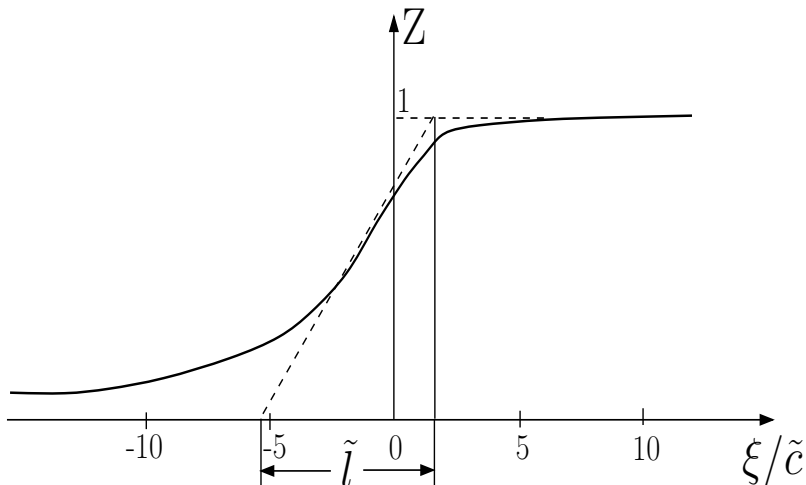


Рис. 6.3. Профиль фазовой волны переключения относительной объемной деформации

6.2): $\tilde{\varepsilon}'_{\gamma} = \tilde{\varepsilon}'_{th} \approx \tilde{\varepsilon}_{th}/2$. Эта волна должна описываться уравнением

$$\dot{\tilde{\varepsilon}} = d_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\varepsilon}''_{xx} + \frac{1}{\tau_{\tilde{\varepsilon}}} (\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}'_{th})^2 (\tilde{\varepsilon}_{\alpha} - \tilde{\varepsilon}), \quad (6.31)$$

в котором в отличие от (6.16) нелинейная функция $F(\tilde{\varepsilon})$ имеет только два значения $\tilde{\varepsilon}'_{th}$, $\tilde{\varepsilon}_{\alpha}$, удовлетворяющих уравнению $F(\tilde{\varepsilon}) = 0$ ¹. Вводя обозначения

$$Z = \frac{\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}'_{th}}{\tilde{\varepsilon}_{\alpha} - \tilde{\varepsilon}'_{th}}, \quad \tilde{\tau} = \frac{\tau_{\tilde{\varepsilon}}}{(\tilde{\varepsilon}_{\alpha} - \tilde{\varepsilon}'_{th})^2}, \quad (6.32)$$

переходя к безразмерным времени \tilde{t} и координате \tilde{x}

$$\tilde{t} = \frac{t}{\tilde{\tau}}, \quad \tilde{x} = x \left(\frac{1}{d_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\tau}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (6.33)$$

перепишем (6.31) в виде

$$\dot{Z}_{\tilde{t}} = Z''_{\tilde{x}\tilde{x}} + Z^2 (1 - Z). \quad (6.34)$$

¹Заметим, что уравнение (6.31) имеет решение (6.18) для уединенного волнового фронта, распространяющегося со скоростью (6.20).

Решение Z типа бегущей волны $Z = Z(\xi)$

$$Z(\xi) \equiv Z(\tilde{x} + \tilde{c}\tilde{t}), \quad (6.35)$$

где \tilde{c} - безразмерная скорость волны

$$\tilde{c} = c \left(\frac{\tilde{\tau}}{d_{\tilde{\varepsilon}}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (6.36)$$

удовлетворяет уравнению

$$Z''_{\xi\xi} - \tilde{c} Z'_{\xi} + Z^2 (1 - Z) = 0. \quad (6.37)$$

В случае больших значений $\tilde{c}^2 \gg 1$ можно использовать простую процедуру отыскания решения уравнения (6.37) в виде суммы слагаемых, имеющих возрастающие степени малого параметра \tilde{c}^{-2} , которая подробно изложена в [249]. Полагая скорость $c = |\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2|$ известной (см. п. 6.3.2) и условие $\tilde{c}^2 \gg 1$ выполненным, оценим ширину фронта фазовой $\tilde{\varepsilon}$ -волны переключения. Следуя [249], обозначим

$$\varphi = -\tilde{c} Z'_{\xi} \quad (6.38)$$

и перепишем (6.37) через координаты фазовой плоскости

$$\frac{1}{\tilde{c}^2} \frac{d\varphi}{dZ} = \frac{\varphi - Z^2 (1 - Z)}{\varphi}. \quad (6.39)$$

Будем искать решения уравнения (6.39) в форме

$$\varphi(Z, \tilde{c}^{-2}) = g_0(Z) + \tilde{c}^{-2} g_1(Z) + (\tilde{c}^{-2})^2 g_2(Z) + \dots \quad (6.40)$$

Тогда, после подстановки (6.40) в (6.39) и приравнивания членов с одинаковыми степенями (\tilde{c}^{-2}) , получаем

$$g_0(Z) = Z^2(1 - Z), \quad (6.41)$$

$$g_1(Z) = g_0 \frac{d g_0}{d Z} = Z^3 (1 - Z) (2 - 3 Z), \quad (6.42)$$

$$g_2(Z) = \frac{d}{d Z} (g_0 g_1) = 2 Z^4 (1 - Z) (1 - 2 Z) (5 - 6 Z). \quad (6.43)$$

Безразмерную ширину фронта \tilde{l} фазовой $\tilde{\varepsilon}$ -волны переключения определим соотношением [249]

$$\tilde{l} \sim \frac{1}{Z'_\xi(Z_0)}, \quad (6.44)$$

где Z_0 является решением уравнения

$$\frac{d\varphi}{dZ} = 0 \quad (6.45)$$

и отвечает точке перегиба функции $Z(\xi)$, то есть $Z''_{\xi\xi} = 0$ при $Z = Z_0$. Из (6.45), (6.40) - (6.43) легко находим

$$Z_0 = \frac{2}{3} + \frac{14}{27} \tilde{c}^{-2} + O(\tilde{c}^{-4}). \quad (6.46)$$

Подстановка (6.46) в (6.40) с учетом (6.38) дает

$$Z'_\xi(Z_0) = \frac{1}{\tilde{c}} \frac{4}{27} + O(\tilde{c}^{-5}). \quad (6.47)$$

С помощью (6.44), (6.47) получаем

$$\tilde{l} \sim \frac{27}{4} \tilde{c}. \quad (6.48)$$

Переходя с учетом соотношений (6.36), (6.33) к размерным величинам, из (6.48) имеем

$$l \sim 7 c \tilde{\tau} = \frac{7 c \tau_{\tilde{\varepsilon}}}{(\tilde{\varepsilon}_\alpha - \tilde{\varepsilon}'_{th})^2} \approx \frac{7 c \tau_{\tilde{\varepsilon}}}{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2}, \quad (6.49)$$

где учтено, что $\tilde{\varepsilon}'_{th} \ll \tilde{\varepsilon}_\alpha$.

До сих пор постоянная с размерностью времени $\tau_{\tilde{\varepsilon}}$ играла роль свободного феноменологического параметра, для определения которого необходимо использовать некоторое дополнительное условие. Такое условие вытекает из требования согласованного распространения волн смещений атомов, обеспечивающих достижение пороговых деформаций $\tilde{\varepsilon}'_{th}$, с (T) -, (μ) - и $\tilde{\varepsilon}$ -волнами переключения, поскольку это требование наряду с условием равенства скоростей

распространения волн (обсуждавшимся выше) предполагает и одинаковый пространственный масштаб ширин фронтов T -, μ - и $\tilde{\varepsilon}$ -фазовых волн переключения. Действительно, однозначная связь химического потенциала электронов μ с концентрацией электронов (а значит, и с удельным объемом) делает невозможной реализацию ФВП μ -типа с шириной фронта l_μ , заметно отличающейся от ширины фронта $\tilde{\varepsilon}$ -волны. Естественно считать, что и процесс выделения тепла, моделируемый введенной в уравнение (6.7) нелинейной функцией $F(\psi)$, происходит в области со значениями $\tilde{\varepsilon} > \tilde{\varepsilon}'_{th}$, то есть в области фронта фазовой $\tilde{\varepsilon}$ -волны переключения. Поэтому в качестве дополнительного условия принимаем

$$l \sim l_\mu \sim l_T \sim \lambda/2, \quad (6.50)$$

где λ -длина волны смещений порядка $(10^{-7} - 10^{-6})$ м. Для указанного диапазона λ из (6.50), (6.49) при $c \sim 5 \cdot 10^3$ м/с находим $\tau_{\tilde{\varepsilon}} \sim 2(10^{-15} - 10^{-14})$ с. Время $\tilde{\tau} = \tau_{\tilde{\varepsilon}}/(\tilde{\varepsilon}_\alpha - \tilde{\varepsilon}'_{th})^2$, определяющее, согласно (6.49), ширину фронта l , при $\tilde{\varepsilon}_\alpha \sim 2,4 \cdot 10^{-2}$ оказывается порядка 10^{-11} с.

Теперь легко убедиться, что при $\tau_{\tilde{\varepsilon}} \sim (10^{-15} - 10^{-14})$ с выполняется использованное при анализе предположение $\tilde{c}^2 \gg 1$. Используя соотношения, связывающие $d_{\tilde{\varepsilon}}$, $\tau_{\tilde{\varepsilon}}$ и Γ , P , A , $\tilde{\varepsilon}_\alpha$, $\tilde{\varepsilon}_{th}$, приведенные ниже формулы (6.21), находим

$$\frac{d_{\tilde{\varepsilon}}}{\tilde{\tau}} = \frac{P \tilde{\varepsilon}_{th} \tilde{\varepsilon}_\alpha}{\tau_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\tau} A} \approx \frac{P \tilde{\varepsilon}_{th} \tilde{\varepsilon}_\alpha^3}{A \tau_{\tilde{\varepsilon}}^2}, \quad (6.51)$$

откуда при $P \sim 4 \cdot 10^{-7}$ Дж/м, $A = 2 \cdot 10^{11}$ Дж/м³, $\tilde{\varepsilon}_{th} \sim 10^{-3}$, $\tilde{\varepsilon}_\alpha \sim 2,4 \cdot 10^{-2}$, $\tau_{\tilde{\varepsilon}} \sim (10^{-15} - 10^{-14})$ с получаем $d_{\tilde{\varepsilon}}/\tilde{\tau} \sim (10^2 - 10^4)$ м²/с². Тогда, согласно (6.36), для \tilde{c}^2 при $c \sim 5 \cdot 10^3$ м/с получаем $\tilde{c}^2 \sim (10^5 \div 10^3) \gg 1$.

Интересно отметить, что при тех же значениях P , A , $\tilde{\varepsilon}_{th}$, $\tilde{\varepsilon}_\alpha$ и $\tau_{\tilde{\varepsilon}} \sim 10^{-14}$ с кинетический коэффициент $\Gamma \sim 10^{-2}$ м³/(Дж·с), а скорость триггерной волны переключения, согласно (6.30), $V_{\tilde{\varepsilon}} \sim 10$ м/с, почти на три порядка меньше скорости роста мартенситного кристалла.

Большие значения \tilde{c}^2 позволяют считать обоснованным (с высокой степенью точности) отбрасывание в формулах (6.47), (6.46) слагаемых порядка \tilde{c}^{-2} и, тем более, порядка \tilde{c}^{-4} , \tilde{c}^{-5} . Это означает, что в разложении (6.40) достаточно ограничиться первым слагаемым. Данное приближение соответствует отбрасыванию второй производной $Z''_{\xi\xi}$ в (6.37). Тогда после элементарного интегрирования из (6.37) находим выражение, определяющее профиль фазовой $\tilde{\varepsilon}$ -волны:

$$\frac{Z}{(1-Z) \exp(Z^{-1})} = \exp\left(\frac{\xi}{\tilde{c}}\right). \quad (6.52)$$

Из (6.52) следует, что $Z \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow -\infty$ и $Z \rightarrow 1$ при $\xi \rightarrow +\infty$. На рис. 6.3 показаны профиль $\tilde{\varepsilon}$ -волны, построенный с помощью формулы (6.52), и ширина \tilde{l} , найденная из (6.44), (6.48). Как видно из рисунка, профиль несимметричен относительно точки с координатами $Z = 1/2$, $\xi/\tilde{c} = -2$, не совпадающей с точкой перегиба ($Z = 2/3$, $\xi/\tilde{c} \approx -0,807$) функции (6.52), и характеризуется более плавным изменением при $Z \rightarrow 0$ по сравнению с изменением при $Z \rightarrow 1$, что, в какой-то мере, оправдывает использование зонной структуры ГЦК-модификации железа при анализе условия генерации волн смещений.

6.4 Заключение к главе 6

Подведем итоги:

1. Качественный подход, предложенный в главе 6, основывается на выделении нескольких распространяющихся в волновом режиме взаимосвязанных процессов, определяющих в рамках волновой модели механизм роста мартенситного кристалла.
2. Ширина движущейся межфазной границы, при отсутствии волн смещений атомов, определяется шириной фронта триггерной $\tilde{\varepsilon}$ -волны переключения l_{ε} и составляет несколько межатомных расстояний.

В присутствии волн смещений атомов, обеспечивающих уровень пороговой деформации, $\tilde{\varepsilon}$ -волна модифицируется в фазо-

вую волну переключения с шириной фронта l , определяемой длинами волн смещений λ . При $\lambda/2 \sim (10^{-7} \div 10^{-6})$ м величина l на два-три порядка превышает $l_{\tilde{\varepsilon}}$. Область $B_{\gamma-\alpha}$ с высокой степенью неоднородности температуры и химического потенциала электронов по существу совпадает с фронтом модифицированной $\tilde{\varepsilon}$ -волны.

Сложная структура волнового процесса оправдывает целесообразность введения специального термина „волна превращения“ применительно к стадии роста мартенсита, использовавшегося ранее в [77] без конкретизации структуры волны.

3. Кооперативность структурной перестройки - характерная черта мартенситного превращения - обеспечивается действием в области $B_{\gamma-\alpha}$ мазерного механизма, преобразующего часть энергии превращения в энергию волн смещений атомов.
4. Уточнение схемы управления ростом мартенситного кристалла парой волн, развитой в главе 5, сводится к замене волн смещений с бесконечными фронтами волновыми пучками. Представление о волновых пучках (волнах смещений с ограниченным фронтом) является естественным для описания роста цилиндрического макрозародыша (см. п. 1.3), поперечный размер которого и будет определять минимальный размер волнового фронта.
5. В связи с переходом к интерпретации, использующей волновые пучки, в схеме с двумя внешними источниками гиперзвука, обсуждавшейся в заключительном параграфе главы 5, представляет интерес исследование эффективности стимуляции роста кристаллов в зависимости от соотношения пространственных размеров волновых фронтов источников. В частности, переход к близко расположенным (и правильно ориентированным) линейным излучателям с поперечными размерами $\leq 10^{-6}$ м означал бы моделирование картины генерации длинноволновой составляющей волн смещений на стадии образования отдельного зародыша. Не исключено, что

успешным при моделировании процесса образования цилиндрического макрозародыша окажется использование одного линейного ориентированного излучателя. Например, из описания габитусов, близких $\{557\}$, $\{225\}$, в двухволновой схеме очевидно, что для возбуждения волн, бегущих вблизи осей $\langle 00\bar{1} \rangle$, $\langle 110 \rangle$, следует ориентировать излучатель в направлении $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$, лежащем в плоскости габитуса. Успех подобного эксперимента заключался бы в появлении кристаллов с ограниченным набором габитусов (от одного до четырех) вида $(h \pm \delta, h \mp \delta, \pm l)$, где $\delta < 1$, и свидетельствовал в пользу зарождения на дислокациях с типичными для кристаллов с ГЦК решеткой векторами Бюргерса. Моделирование процесса выделения энергии на стадии зародышеобразования можно попытаться провести, используя узкие (с поперечным размером $\sim 10^{-6}$ м) ориентированные пучки электронов, ионов, фотонов с близкой к линейной формой следа воздействия на поверхности монокристалла и длительностью воздействия $t_i \sim 10^{-10} \div 10^{-11}$ с.

6. Взаимодействие волновых пучков друг с другом и с фазовыми волнами переключения T - или μ -типа отражается требованием их согласованного распространения $\mathbf{V} = \mathbf{c} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$.
7. В случае $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в качестве макроскопических характеристик используются объемный эффект и макроскопический сдвиг с типичным значением 0,2. Однако легко показать, что рассмотренная выше модель термодинамического потенциала (6.21) применительно к макросдвигу дает пороговое значение сдвиговой деформации, на порядок превышающее порог при объемной деформации, даже для A , равного минимальному сдвиговому модулю $C' = (C_{11} - C_{12})/2$. Поэтому можно ожидать, что сдвиговая макродеформация будет играть подчиненную роль, возникая, вслед за объемной, в области, теряющей устойчивость вследствие воздействия продольных волн смещений. Иначе говоря, выбор относительного изменения объема (фактически играюще-

го роль параметра порядка) в качестве макрохарактеристики представляется предпочтительным. Подобная точка зрения близка к мнению автора работы [77] о ведущей роли продольных волн в формировании центральной зоны (мидриба) линзовидных кристаллов мартенсита.

8. В случае линзовидных кристаллов величина $|c|$ определяет наибольшую (торцевую) скорость роста мидриба и является, таким образом, важной характеристикой процесса роста. Это обстоятельство обуславливает необходимость прецизионного (а не по порядку величины) измерения скорости c независимыми методами. В частности, методику [27] можно улучшить, иницируя мартенситное превращение сильным магнитным полем в образцах с явно выраженным двухстадийным течением превращения [34, 36]. Кроме надежного отделения интервала времени для первой быстро протекающей стадии, ориентированием монокристаллов аустенита можно добиться существенного снижения количества ориентировок мартенсита (см. п. 5.3.3), что позволит более точно определить и размер кристаллов.

Сделаем ряд замечаний:

1. Температурное поле на границе растущего кристалла мартенсита в форме эллиптического цилиндра с малым отношением полуосей поперечного сечения обсуждалось в [255]. Постановка задачи в [255] близка к постановке задачи о промерзании влажного грунта [256]: уравнение теплопроводности не содержит источников, а скорость движения границы считается пропорциональной значению градиента температуры на границе раздела. Указанная постановка существенно отличается от использованной нами. Тем не менее, интересно отметить, что полученная в [255] оценка радиуса кривизны $\rho \sim 10^{-6}$ м (кромки кристалла мартенсита), начиная с которой реализуется режим адиабатического роста кристалла, подтверждает возможность адиабатического роста цилиндрического макрозародыша с радиусом порядка 10^{-6} м.

2. Описание мартенситного превращения, как процесса деформации решетки, представляется наиболее естественным. В проведенном выше рассмотрении различались деформация, обусловленная волнами смещений, управляющая процессом роста мартенсита, и наблюдаемая макроскопическая деформация. Очевидно, что с феноменологической точки зрения подобная трактовка представляет собой один из возможных вариантов описания в схеме микро- и макроскопических параметров порядка, взаимодействующих между собой [1]. Отметим также работу [257], в которой акцентируется внимание на выборе параметра порядка, не сводящегося к наблюдаемой макродеформации, и иллюстрируется применимость стрикционной модели при трактовке термодинамических закономерностей, типичных для термоупругих мартенситных превращений.
3. При больших скоростях движения границы фаз необходимо, вообще говоря, учитывать систематическое движение электронов со скоростью локальной решетки, аналогичное систематическому движению электронов со скоростью ионов в упругой волне (см., например, главу 3 в [258]). В пользу эффекта увлечения электронов движущейся границей свидетельствуют результаты экспериментов [29, 259]. Нетрудно показать, однако, что вклад в инверсную разность населенностей, обусловленный этим эффектом увлечения, имеет порядок $\Delta\sigma_0 \sim 10^{-4}$ и не является определяющим в генерации фононов, как это видно из сравнения со значениями σ_0 в табл. 3.1.
4. Кроме описания границы фаз на основе функционала типа (6.21) отметим конструктивный подход Лихачева [260], позволяющий в рамках механики сплошных сред рассматривать границы раздела в твердых телах (без конкретизации их строения) как самостоятельные планарные дефекты.

Результаты, относящиеся к качественному анализу согласованного распространения волн переключения и смещения, мо-

делирующего движение границы фаз при $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении, опубликованы в работах [261–264]. Изложение материала в главе 6 в основном следует работе [262].

Заключение

На основе анализа богатой экспериментальной информации и существующих теоретических представлений предложен новый модельный подход для описания стадии быстрого (торцевого) роста кристаллов мартенсита при ГЦК-ОЦК ($\gamma - \alpha$) мартенситном превращении в сплавах на основе железа. Особенности протекания этого превращения (сверхзвуковая скорость роста, аномально большое переохлаждение ниже точки равновесия фаз, отсутствие смягчения фононных мод в предпереходной области температур) позволяют выделить его в качестве своеобразного „предельного случая“ среди бездиффузионных превращений, наиболее сильно контрастирующего с другим „предельным случаем“ структурных превращений, находящим адекватное описание в рамках концепции мягкой фононной моды.

Стадия роста интерпретируется как процесс распространения деформации, управляемый волнами смещений атомов с относительно большими длинами волн $\lambda \sim (10^{-7} - 10^{-6})$ м. При этом кооперативный характер смещений атомов возникает лишь в случае реализации существенно неравновесных условий в подсистеме 3d-электронов, обладающих набором макроскопического числа пар инверсно населенных эквидистантных состояний, переходы электронов между которыми приводят к генерации волн смещений решетки (эффект фононного мазера). Поскольку бегущая волна смещений атомов с квантовой точки зрения представляет собой макроскопическое число фононов с ненулевой частотой, описание мартенситного превращения, основанное на использовании бегущих волн смещений, является описанием в рамках концепции „жестких“ фононных мод, соответствующей новому научному на-

правлению теоретических исследований $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения.

Обзор результатов, приведенных в заключительных параграфах глав 2-6 монографии позволяет констатировать, что поставленные в п. 1.5 задачи решены по крайней мере на качественном уровне. Тем не менее, мы остановимся здесь еще раз на основных выводах, принципиально важных для описания $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в сплавах на основе железа, а также на ключевых количественных оценках, результатах, полученных для стадии зарождения мартенсита, предсказаниях теории и перспективах ее развития.

Основные выводы

1. На стадии быстрого роста кристалла мартенсита существует пограничная межфазная область, характеризующаяся интенсивными потоками электронов при наличии сильных градиентов температуры и, что наиболее важно, - химического потенциала электронов.
2. Дрейф электронов приводит к возникновению инверсной населенности пар электронных состояний, которые локализованы вблизи поверхностей S пространства квазиимпульсов, определяемых условием обращения в нуль в точках поверхности проекции групповой скорости электронов на направления $\vec{\nabla}T$ или $\vec{\nabla}\mu$.
3. Число пар инверсно населенных электронных состояний $3d$ -зон железа является макроскопическим.
4. Процесс генерации волн смещений атомов обусловлен индуцированным излучением фононов неравновесными $3d$ -электронами при переходах электронов между инверсно населенными состояниями и аналогичен излучению фотонов в лазере.
5. Волны смещения, управляющие процессом роста кристалла мартенсита, являются продольными (или квазипродольными)

с частотами $\nu \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$ из гиперзвукового диапазона и амплитудами, обеспечивающими уровень деформации $\varepsilon \sim 10^{-3}$, достаточный для инициирования $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения. Режим начального возбуждения волн при образовании зародыша α -фазы является жестким.

6. Важны не отдельные волны смещений, а их определенные комбинации. Так например, стадии быстрого роста пластины мартенсита сопоставляется распространение пары волн, стимулирующих процесс плоской деформации типа растяжения - сжатия в ортогональных направлениях.
7. Волны смещений существуют в виде волновых пучков, распространяющихся согласованно с ограниченным в пространстве фронтом ступенчатой волны относительной объемной деформации, и выполняют функции „волн-пилотов“, прокладывающих путь мартенситной реакции.

Ключевые количественные оценки

1. Градиент химического потенциала электронов $\vec{\nabla}\mu$ - основной источник неравновесности в электронной подсистеме. Оценка величины $\vec{\nabla}\mu$ требует знания разности $\Delta\mu = \mu_\gamma - \mu_\alpha$ химических потенциалов фаз и ширины l межфазной области. Значение $\Delta\mu \approx 0,16 \text{ эВ}$ найдено для подсистем s- и d-электронов в п. 1.5 и в п. 4.5.3. Величина l может быть оценена по формуле (6.49). Учитывая, что входящая в (6.49) постоянная τ_ε играет роль минимального интервала времени, характеризующего процесс деформации Бейна, в качестве физически разумного значения следует принять $\tau_\varepsilon \sim 10^{-14} \text{ с}$ - время, за которое атом смещается с околосвуковой скоростью на расстояние порядка $0,1 a$ (a - параметр решетки). Тогда из (6.49) получаем $l \sim 10^{-6} \text{ м}$, и $\nabla\mu \sim \Delta\mu/l \sim 10^5 \text{ эВ/м}$.
2. В предлагаемой волновой модели роста мартенсита центральную роль играет требование выполнения условия генерации

волн смещений $\sigma_0 > \sigma_{th}$, обсуждаемое в п. 3.1, Оценка инверсной разности населенностей пары электронных состояний при дрейфе электронов в поле $\vec{\nabla}\mu$ дает $\sigma_0(\nabla\mu) \geq 10^{-3}$. Пороговое значение $\sigma_{th} \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$ получено в п. 3.1 из формулы (3.10). При оценке σ_{th} важную роль играет число пар инверсно населенных состояний R_q , пропорциональное площади Σ_q приведенного листа S-поверхности. При $\Sigma_q \approx 20(\pi/a)^2$ условие $\sigma_0 > \sigma_{th}$ выполняется при обычных значениях матричного элемента электрон-фононного взаимодействия W_q (W_q берется в приближении сильной связи); подчеркнем, что ранее (см., например, [265]) неустойчивость, связанная с нарастанием звуковой волны за счет индуцированного излучения фононов, считалась нереализуемой в металлах.

3. Важной качественной характеристикой является и значение максимальной деформации ε_m , которая может поддерживаться в волне смещений. Оценка ε_m проводится в п. 3.3 с помощью формулы (3.42), справедливой для стационарных условий. Найдено, что $\varepsilon_m \sim 10^{-3}$ при $\sigma_0 \approx 2,5 \sigma_{th}$.

Полученное в п. 3.3 неравенство $t_u \gg t_{\nabla}$ для времени установления стационарной амплитуды (или деформации ε_m) в волне смещений - t_u и времени жизни градиента химического потенциала t_{∇} показывает, что использование стационарной оценки ε_m оправдано лишь при жестком режиме возбуждения волн. Таким образом, связывая рост мартенсита с волнами смещений и считая решетку аустенита устойчивой в точке M_S к деформациям, меньшим 10^{-3} , приходим к выводу: процесс зародышеобразования мартенсита сопровождается возбуждением волн с $\varepsilon_m \sim 10^{-3}$.

4. Принципиально важна и оценка порогового значения $\tilde{\varepsilon}_{th}(M_S)$ относительной объемной деформации $\tilde{\varepsilon}$ при температуре M_S . Дело в том, что совместное распространение волн смещений с межфазной границей возможно лишь в случае, когда относительная объемная деформация в волнах смещений $\tilde{\varepsilon}_u$ превы-

шает $\tilde{\varepsilon}_{th}(M_S)$. В противном случае ($\tilde{\varepsilon}_u < \tilde{\varepsilon}_{th}(M_S)$) движение границы фаз описывается триггерной волной переключения с единственной скоростью распространения, меньшей по порядку величины скорости звука. В п. 6.3.2, 6.3.1 показано, что $\tilde{\varepsilon}_{th}(M_S) \approx 2,5 \cdot 10^{-4}$, и, значит, при $\varepsilon_m \sim 10^{-3}$ условие $\tilde{\varepsilon}_u > \tilde{\varepsilon}_{th}(M_S)$ выполняется.

Эксперименты, предлагаемые для проверки теории

1. Измерение контактной разности потенциалов $\Delta\varphi$ между γ - и α -фазами (см. п. 2.5). Величина и знак $\Delta\varphi$ нужны соответственно для определения инверсной разности населенностей $\sigma_0 \sim \Delta\varphi$ и направления распространения волн смещений по отношению к $\vec{\nabla}\mu$ (см. пояснение к табл. 2.1).
2. Измерение отношения модулей скоростей продольных волн $\varkappa_e = c_{\langle 110 \rangle} c_{\langle 001 \rangle}^{-1}$ в аустените при температуре M_S в зависимости от концентрации $C_{л.э.}$ легирующего элемента - для проверки критерия первой смены габитусных плоскостей ($\{557\} \rightarrow \{225\}$). Положительный результат эксперимента заключается в росте \varkappa_e при увеличении $C_{л.э.}$ и приближении к концентрации, начиная с которой устойчиво наблюдается габитус $\{225\}$ (см. п. 5.1.3).
3. Прецизионное измерение скорости быстрого торцевого роста кристалла мартенсита и сравнение с предсказываемым теорией значением $|\mathbf{c}| \approx |\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2|$, где скорости \mathbf{c}_1 и \mathbf{c}_2 рассчитываются после независимых измерений упругих модулей аустенита при температуре M_S (см. пункт 8 в п. 6.4).
4. Наблюдение ориентированного роста кристаллов мартенсита при внешнем воздействии гиперзвука и сильного магнитного поля, а также при лазерном импульсном воздействии с формой следа на поверхности образца, приближающейся к линейной.

Отметим, что обнаружение в [244] предсказанного ориентационного эффекта в поле $H \sim 10^7$ А/м, превышающем по порядку вели-

чины поля размагничивания и магнитной анизотропии, во-первых, свидетельствует в пользу мазерного механизма генерации фононов и, во-вторых, подтверждает вывод о связи второй смены габитусов: $\{557\} \rightarrow \{3\ 10\ 15\}$ в системе Fe - Ni, $\{225\} \rightarrow \{259\}$ в системе Fe - C, с исключением из спектра генерируемых волн квазипродольных волн с направлениями скоростей вблизи осей симметрии второго порядка ГЦК решетки.

Касаясь вопроса о дальнейших исследованиях, прежде всего отметим, что понимание процессов, происходящих на стадии роста мартенситного кристалла, должно способствовать построению физических моделей и предшествующей стадии зародышеобразования, и последующей стадии аккомодации сосуществующих фаз. Так например, требование согласования стадий зарождения и управляемого волнами смещений роста, обусловленного существованием неравновесных условий на межфазной границе, приводит к выводу о быстром возникновении макрозародыша, обсуждавшемуся в п. 1.3.

Достигнутый к настоящему времени успех в описании стадии зарождения связан с объединением концепций гетерогенного (в упругом поле дислокации) зарождения и волнового роста мартенсита [266–272]. Расчеты упругих полей прямолинейных дислокаций, типичных для исходной γ -фазы, показали, что уже отдельные смешанные дислокации могут играть роль центров зарождения (ЦЗ) мартенситных кристаллов. Характеристики ЦЗ и макроскопические морфологические признаки мартенсита генетически связаны между собой, в результате имеется 24 различных варианта соответствия ЦЗ - кристалл.

Упругое поле дислокации нарушает исходную симметрию решетки, выделяя области, наиболее благоприятные для зарождения мартенсита. Такая область имеет форму прямоугольного параллелепипеда, ребра которого ориентированы вдоль собственных векторов $\vec{\xi}_i$ тензора деформации $\hat{\epsilon}$, причем для собственных значений ϵ_i выполняются условия

$$\epsilon_1 > 0, \quad \epsilon_2 < 0, \quad |\epsilon_3| \ll |\epsilon_{1,2}|,$$

обеспечивающие существование близких к плоским слабоискаженных поверхностей (СИП) с нормальными

$$(\mathbf{N}_{\text{сип}})_{1,2} \parallel \vec{\xi}_2 \mp \vec{\xi}_1 \sqrt{\varepsilon_1/|\varepsilon_2|}, \quad |\vec{\xi}_{1,2}| = 1.$$

Напомним, что при термодинамической интерпретации сопряжение фаз по слабоискаженным (при $\varepsilon_3 = 0$ - инвариантным) плоскостям считается выгодным с точки зрения минимизации энергии упругих искажений. При волновом же описании габитусные плоскости возникают в ходе быстрого (сверхзвукового) формирования мартенситного кристалла, то есть имеют чисто динамическую природу.

Среди $\mathbf{N}_{\text{сип}}$ имеются близкие к $\langle 557 \rangle$, $\langle 225 \rangle$ для 60° дислокаций с линиями $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ и близкие к $\langle 259 \rangle$, $\langle 3\ 10\ 15 \rangle$ для 30° дислокаций с линиями $\langle 1\bar{2}1 \rangle$, что указывает на различие ЦЗ пакетного и взрывного мартенсита.

Вопрос о направлении макросдвига \mathbf{S} решается параллельно с отбором одного из двух направления нормалей $\mathbf{N}_{\text{сип}}$. Для этого в представлении тензора дисторсии упругого поля в виде суммы диад достаточно выделить часть, содержащую два слагаемых

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{N}_1 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{N}_2, \quad |\mathbf{N}_{1,2}| = 1.$$

Напомним, что диада $\mathbf{S} \cdot \mathbf{N}$ описывает деформацию с инвариантной плоскостью, где \mathbf{N} - нормаль к плоскости, а \mathbf{S} - вектор, характеризующий деформацию формы. Тогда, учитывая, что при температуре M_S начала мартенситного превращения аустенит метастабильно устойчив, естественно полагать в случае $|\mathbf{S}_1| > |\mathbf{S}_2|$ выделенной плоскостью с нормалью \mathbf{N}_1 , а ожидаемое направление макросдвига близким \mathbf{S}_1 , обратное неравенство $|\mathbf{S}_2| > |\mathbf{S}_1|$ выделяет, соответственно, \mathbf{N}_2 и \mathbf{S}_2 .

Важно, что концепция дислокационного зарождения, в которой дислокация является силовым центром (не входящим в объем зародыша), нарушающим симметрию решетки, может быть органично согласована с волновой моделью роста.

Для этого достаточно принять, что превращение начинается с возникновения возбужденного состояния в форме параллелепипе-

да, построенного на векторах $\vec{\xi}_i$, пары граней которого колеблются в противофазе, возбуждая управляющие волны смещений с направлениями волновых нормалей $\mathbf{n}_{1,2}$ близкими $\vec{\xi}_{1,2}$. В простейшем приближении равенств

$$\mathbf{n}_1 = \vec{\xi}_1, \quad \mathbf{n}_2 = \vec{\xi}_2,$$

требование совпадения $N_{\text{син}}$ с волновым габитусом (5.3) приводит к условию

$$\varkappa = \frac{c_2}{c_1} \approx \left[\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|} \right]^{\frac{1}{2}},$$

выполнение которого обеспечивает возможность кинематического согласования волнового описания габитуса с деформационным. Ясно, что если отношение деформаций растяжения и сжатия в волновом режиме совпадает с \varkappa^2 , то достигается и динамическое согласование. Не вызывает сомнений, что закономерное отклонение нормалей $\mathbf{n}_{1,2}$ управляющих волн от осей симметрии идеальной кубической решетки диктуется симметрией упругого поля ЦЗ на стадии зарождения при жестком режиме возбуждения колебаний (волн). Интересно также, что ориентация оси $\vec{\xi}_3$, являющейся осью цилиндрического зародыша α -фазы, может заметно (особенно для 30° дислокаций) отклоняться от линии дислокации.

Уточнение картины зарождения, позволившее наряду с временем жизни, энергией, пространственной формой возбужденного состояния указать и ориентацию $\vec{\xi}_3$, открыло возможность для его физического моделирования [273,274]. Лазерное воздействие с формой следа, приближающейся к линейной, длительностью $\sim 2 \cdot 10^{-11}$ с, интенсивностью, достаточной для испарения атомов, вызывало запуск $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в монокристаллах Fe - 31,5 Ni, при температурах выше M_S на несколько градусов, только в случае ориентации следа воздействия на плоской поверхности образца, близкой к вычисленному направлению $\vec{\xi}_3$. Ясно, что этот результат, наряду с планируемым прецизионным измерением скорости роста α -мартенсита, играет фундаментальную роль для подтверждения развиваемой динамической теории превращения.

Для перехода к динамическому описанию завершающей стадии превращения полезным, на наш взгляд, является представление волн смещений как предельно узких волновых пучков (с одним из поперечных размеров фронта порядка половины длины волны), существующих в форме полуволновых импульсов (размер импульса в направлении движения пучка $\leq \lambda/2$). Действительно, при уровне деформации $\varepsilon \sim 10^{-3}$, $\lambda/2 \sim 10^{-6}$ м максимальная величина смещения $u_{\max} \approx 1/4 \varepsilon \lambda$ в импульсе оказывается порядка параметра решетки, и, значит, подобные импульсы должны стимулировать процессы: рождения структурных дефектов; разворотов превращающейся решетки (эквивалентных запуску „ротационных мод“ [275]), восстанавливающих, как известно [11, 13, 275], макроскопическую сплошность среды и приводящих к появлению рельефа на поверхности образца, испытывавшего $\gamma - \alpha$ превращение. Разумеется, эти процессы, как и стадия зародышеобразования, тесно связаны со стадией роста и могут быть лишь условно отнесены к стадии аккомодации сосуществующих фаз. Тем не менее, выделение процессов, управляющих мартенситным превращением, и исследование микроскопического механизма их формирования представляются основополагающими при описании роста мартенсита.

Идентификация дислокационных центров зарождения кристаллов мартенсита открывает новые возможности для интерпретации закономерности формирования ансамблей кристаллов путем установления спектра новых ЦЗ, имманентных образовавшемуся кристаллу α - фазы.

Дальнейший прогресс теории $\gamma - \alpha$ превращения в сплавах на основе железа несомненно будет связан:

- с теоретическим исследованием динамики флуктуации решетки в упругих полях дислокаций на стадии зарождения мартенсита, при этом следует ожидать, что именно флуктуации, приводящие к обсуждавшемуся выше возбужденному состоянию решетки в форме вытянутого параллелепипеда, наиболее вероятны;
- с уточнением области пространственной локализации возбуж-

денного состояния в поле дислокации (кратчайшего расстояния до линии дислокации) и его наиболее вероятного поперечного размера;

- с уточнением структуры электронного спектра в окрестности дислокационного центра зарождения и области $B_{\gamma-\alpha}$. При этом должны учитываться:

- 1) возможность сосуществования смеси электронных конфигураций атомов железа (принципиальная схема подобного расчета зонного спектра предложена в [276]);
- 2) влияние искажений решетки на форму S-поверхностей и дисперсию энергии на них в окрестности энергии Ферми.

Отметим, наконец, что S-поверхности являются дополнительными объектами в пространстве квазиимпульсов, классифицирующими электронные состояния с точки зрения их вклада в процессы переноса. Поэтому возможность существования обширных S-поверхностей должна учитываться при исследовании и интерпретации явлений, для описания которых в сплавах переходных металлов на первом этапе удобно использовать приближение когерентного потенциала [277].

Предложенная волновая модель управления ростом α -кристалла, по-видимому, является универсальной для быстро протекающих мартенситных превращений I рода, связанных с дислокационным зарождением. Пороговая деформация для таких МП имеет характер растяжения - сжатия в ортогональных направлениях. Для атомов в межфазной области преодоление энергетического барьера в волновом режиме происходит кооперативным путем. Причем управляющие волны смещений, задавая макроскопические морфологические признаки мартенситного кристалла, не определяют конечные положения атомов. Эти положения зависят от ближних межатомных взаимодействий. Смещения атомов к новым положениям равновесия могут инициироваться более коротковолновыми, по сравнению с управляющими, волнами как в предпереходном состоянии, так

и на стадии роста. Эта дополнительная система волн, наряду с аккомодационными процессами, должна определять внутреннюю тонкую структуру мартенситных пластин.

Подводя окончательный итог, можно сказать, что полученные результаты свидетельствуют о становлении качественно нового этапа исследования $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в рамках волнового подхода, позволяющего, в принципе, построить и описать цепочку причинно-следственных связей вида: дислокационный центр зарождения; начальное возбужденное состояние; неравновесные условия; особенности электронной структуры; спектр генерируемых волн смещений; наблюдаемые морфологические признаки.

Причем именно волны смещений, управляющие ростом, переносят информацию об упругом поле, создаваемом центром зарождения в области локализации зародыша, обеспечивая реализацию генетического соответствия характеристик макроскопического кристалла мартенсита и центра зарождения. Ясно, что в развиваемой динамической теории $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения управляющие ростом волны смещений атомов выполняют роль промежуточного звена между микроскопическим и макроскопическим описанием.

Литература

- [1] Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников. *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*. М.:Наука. 1984. С. 248.
- [2] В.Г. Вакс. *Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков*. М.:Наука. 1973. С. 328.
- [3] Ю.М. Гуфан. *Структурные фазовые переходы*. М.:Наука. 1982. С. 304.
- [4] А. Брус, Р. Каули. *Структурные фазовые переходы*. М.: Мир. 1984. С. 408.
- [5] В.Г. Вакс, В.И. Зиненко, В.Е. Шнейдер Микроскопическая теория структурных фазовых переходов типа порядок - беспорядок в кристаллах // УФН. 1983. Т. 141. № 4. С. 629–673.
- [6] Б.А. Струков, А.П. Леванюк. *Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах*. М.:Наука. 1983. С. 240.
- [7] Л. Кауфман, М. Козн Термодинамика и кинетика мартенситных превращений // Успехи физики металлов. 1961. Т. IV. С. 192–289.
- [8] H. Warlimont, G. Hausch, A. Prasetyo and F. Renaud Relations between elastic properties and diffusionless structural transition // Proceedings of the first JIM Int. Symposium on „New aspects of martensitic transformation“ , Japan institute of Metals. 1976. P. 153–158.
- [9] H. Warlimont On the classification of structural phase transformation // J. Microsc. Spectrosc. Electron.. 1977. V. 2. P. 333–344.

- [10] Д. Кристиан. *Теория превращений в металлах и сплавах*. Т. 1. М.: Мир. 1978. С. 808.
- [11] Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков. *Физика металлов*. М.: Атомиздат. 1978. С. 352.
- [12] Г.В. Курдюмов. *Явления закалки и отпуска стали*. М.: Металлургиздат. 1960. С. 64.
- [13] Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. *Превращения в железе и стали*. М.: Наука. 1977. С. 240.
- [14] А.И. Лысак, Б.И. Николин. *Физические основы термической обработки стали*. Киев: Техника. 1975. С. 304.
- [15] М.А. Кривоглаз, В.Д. Садовский, Л.В. Смирнов, и др. *Закалка стали в магнитном поле*. М.: Наука. 1977. С. 120.
- [16] М.Л. Бернштейн, В.А. Займовский, Л.М. Капуткина. *Термомеханическая обработка стали*. М.: Металлургия. 1983. С. 480.
- [17] *А.Л. Ройтбурд* Современное состояние теории мартенситных превращений // Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения. 1972. С. 7–32.
- [18] *А.Л. Ройтбурд, Э.П. Эстрин* Мартенситные превращения // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. М.: ВИНТИ. 1970. С. 5–102.
- [19] *A.L. Roitburd* Martensitic transformation as a typical phase transformation in solids // Solid state physics: Advance in research and application. New York: Acad. Press. 1978. V. 33. P. 317–390.
- [20] *N. Seljakow, G. Kurdjumov and N. Goodtzow* Eine röntgenographische Untersuchung der Struktur des Kohlenstoffstahls // Zeitschrift für Physik. 1927. V. Bd 45. P. 384–408.
- [21] *В.М. Фридкин* Динамика решетки и фазовые переходы // Современная кристаллография. М.: Наука. 1979. Т. 2. С. 262–296.

- [22] Л.Я. Винников, И.Я. Георгиева, и др. Выделение энергии при образовании мартенсита в железо-никелевых сплавах и особенности его структуры // Металлофизика. 1974. № 55. С. 24–27.
- [23] M. Robin and P.F. Gobin Etude par amplification electronique rapide de la propagation de la martensite dans un alliage ferrum-nickel // Scripta Metall.. 1977. V. 11. P. 669–674.
- [24] В.И. Изотов, П.А. Хандаров Классификация мартенситных структур в сплавах железа // ФММ. 1972. Т. 34. № 2. С. 332–338.
- [25] И.Я. Георгиева, И.И. Никитина Изотермическое и атермическое превращение в сплаве Fe-Ni-Mo // ДАН СССР. 1969. Т. 186. № 1. С. 85–87.
- [26] В.Н. Замбржицкий, О.П. Максимова, Г.В. Щербединский О новом кинетическом варианте мартенситного превращения // ДАН СССР. 1983. Т. 272. № 1. С. 90–94.
- [27] R.F. Bunshah and R.F. Mehl Rate of propagation of martensite // Trans. AIME. 1953. V. 197. P. 1251–1258.
- [28] K. Mukherjee On the dynamics of martensitic transformation // Trans. AIME. 1968. V. 242. P. 1494–1501.
- [29] M. Robin, G. Lormand and P.F. Gobin Electrical emission associated with the martensitic burst of Fe-Ni alloy // J. Phys. (Fr.). 1982. V. 43. № 12. P. 485–490.
- [30] Ф.Л. Локин Скорость мартенситного превращения. М.: Металлургия // Научные доклады высшей школы. 1958. № 2. С. 205–208.
- [31] Ф.Л. Локин Динамическая теория мартенситного превращения // Труды Новочеркас. политехнического института. 1957. Т. 771/85. С. 150.
- [32] K. Takashima, Y. Higo and S. Nunomura The propagation velocity of the martensitic transformation in 304 stainless steel // Phil. Mag. A.. 1984. V. 49. № 2. P. 231–241.

- [33] *В.Н. Арский* Время образования мартенситного кристалла // *Металловедение и обработка металлов*. 1956. № 11. С. 26–29.
- [34] *В.Д. Садовский, Л.Н. Ромашев* Рост кристаллов мартенсита, образовавшихся под действием импульсного магнитного поля // *ДАН СССР*. 1978. Т. 238. № 2. С. 342–344.
- [35] *В.М. Счастливцев, Л.Н. Ромашев, И.Л. Яковлева, В.Д. Садовский* Электронномикроскопическое исследование структуры кристаллов мартенсита, зародившихся под действием импульсного магнитного поля // *ФММ*. 1981. Т. 52. № 4. С. 773–782.
- [36] *В.М. Счастливцев, И.Л. Яковлева, Л.Н. Ромашев* Электронномикроскопическое исследование роста мартенситной пластины // *ФММ*. 1983. Т. 56. № 2. С. 271–279.
- [37] *В.Г. Серебряков, Э.И. Эстрин* Переохлаждение „взрывного“ мартенситного превращения в монокристаллах сплава Fe-Ni // *ДАН СССР*. 1977. Т. 237. С. 322–324.
- [38] *G. Haush and H. Warlimont* Single crystalline elastic constants of ferromagnetic face centered cubic Fe-Ni invar alloys // *Acta Met.*. 1973. V. 21. № 4. P. 401–414.
- [39] *L. Delaey, P.F. Gobin, G. Guenin and H. Warlimont* Premartensitic phenomena // *Proceedings of the International Conference on Martensitic Transformations „ICOMAT-79“*. Cambridge, Massachusetts. USA. 24-29 June, 1979. P. 400–414.
- [40] *E.D. Hallman and B.N. Brockhause* Crystal dynamics of nickel-iron and copper-zinc alloys // *Canadian Journ. Phys.*. 1969. V. 47. № 10. P. 11–17.
- [41] *Y. Endoh* Lattice dynamics in ferromagnetic invar alloys // *J. Magn. and Magn. Mat.*. 1979. № 10. P. 177–182.
- [42] *В.Н. Зверев, В.П. Силин* *Зависимость скорости звука от намагниченности в ферромагнитных металлах*. Препринт Т-19272. М.: ФИ АН СССР. С. 30.
- [43] *В.Н. Зверев, В.П. Силин* К инварной проблеме // *Краткие сообщения по физике*. 1984. № 6. С. 46–49.

- [44] *R.E. Cech and D. Turnbull* Heterogeneous nucleation of the martensitic transformation // Trans. AIME. 1956. V. 206. P. 124–132.
- [45] *Е.З. Винтайкин* Мартенситные превращения // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. М.: ВИНТИ. 1983. Т. 17. С. 3–63.
- [46] *Е.Е. Юрчиков, А.З. Меньшиков* Исследование состояния аустенита перед мартенситным превращением методом эффекта Мессбауэра // ФММ. 1971. Т. 32. № 1. С. 168–170.
- [47] *Ю.Д. Тяпкин, В.Г. Пушин, Р.Р. Романова, Н.Н. Буйнов* Исследование структуры γ и α - фаз в сплавах железа - никель вблизи точки мартенситного превращения. 1. Диффузное рассеяние электронов и рентгеновских лучей // ФММ. 1976. Т. 41. № 5. С. 1040–1047.
- [48] *В.В. Кондратьев, В.Г. Пушин* Предпереходные состояния в сплавах вблизи мартенситного превращения // Фазовые превращения и структура металлов и сплавов. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1982. С. 18–25.
- [49] *В.И. Саррак, С.О. Суворова* Об особенностях состояния аустенита в предмартенситном интервале температур // Известия АН СССР. Металлы. 1982. № 6. С. 90–97.
- [50] *В.В. Кондратьев* О термодинамической устойчивости структурных состояний при мартенситных превращениях // ФММ. 1979. Т. 47. № 1. С. 102–109.
- [51] *F. Falk* Ginzburg-Landau theory and Solitary waves in shape-memory alloys // Z. Phys. B.. 1984. V. 54. P. 159–167.
- [52] *М.А. Кривоглаз* Флуктуонные состояния электронов // УФН. 1973. Т. III. № 4. С. 618–654.
- [53] *А.Л. Ройтбурд* Зарождение на дислокациях при мартенситных превращениях // ДАН СССР. 1981. Т. 256. № 1. С. 80–84.
- [54] *А.В. Гуревич, Р.Г. Минц* Локализованные волны в неоднородных средах // УФН. 1984. Т. 142. № 1. С. 61–98.

- [55] Ю.Н. Петров. *Дефекты и бездиффузионное превращение в стали*. Киев: Наукова думка. 1978. С. 262.
- [56] М.П. Кащенко, В.П. Верещагин Анализ динамических условий устойчивости решетки при реконструктивных мартенситных превращениях в модели фононного мазера // ФММ. 1984. Т. 58. № 3. С. 450–457.
- [57] А.Л. Ройтбурд О доменной структуре кристаллов, образующихся в твердой фазе // ФТТ. 1968. Т. 10. № 12. С. 3619–3627.
- [58] О. Кризement, Э. Гудремон, Ф. Вефер К термодинамике аустенитно - мартенситного превращения // Фазовые превращения в стали. М.:Металлургиздат. 1961. С. 263–271.
- [59] Б.М. Могутнов, И.А. Томилин, Л.А. Шварцман. *Термодинамика железо-углеродистых сплавов*. М.: Металлургия. 1972. С. 263–271.
- [60] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика. Ч.1*. М.: Наука. 1976. С. 584.
- [61] К. Зинер Роль энтропии в стабилизации фаз // Устойчивость фаз в металлах и сплавах. М.:Мир. 1970. С. 96–109.
- [62] С.П. Довгопол, И.А. Заборовская. *Электронная структура, магнетизм и стабильность фаз 3d-металлов и сплавов в твердом и жидком состояниях. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ*. М.: ИВТАН. 1982. С. 132.
- [63] А.Р. Miodownik The effect of magnetic transformations on phase diagrams // Bull. Alloys Phase Diag.. 1982. V. 2. P. 406–412.
- [64] H. Hasegawa and D.G. Pettifor Microscopic theory of the temperature - pressure phase diagram of iron // Phys. Rev. Let.. 1983. V. 50. P. 130–133.
- [65] Ч.С. Баррет, Т.Б. Массальский. *Структура металлов. Ч. II*. М.: Металлургия. 1984. С. 685.
- [66] А.Л. Ройтбурд Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии // УФН. 1974. Т. 113. № 1. С. 105–128.

- [67] *J.R. Patel and M. Cohen* Criterion for the action of applied stress in the martensitic transformation // *Acta Metall.* 1953. V. 1. № 5. P. 531–538.
- [68] *Н.С. Косенко, А.Л. Ройтбурд, Л.Г. Хандрос* Влияние внешнего напряжения на термодинамику и структуру продуктов мартенситного превращения // *Мартенситные превращения. Доклады международной конференции „ICOMAT-77“*. Киев: Наукова думка. 1978. С. 74–78.
- [69] *М.Н. Панкова, А.Л. Ройтбурд* Ориентирующее влияние внешнего напряжения на мартенситное превращение в сплавах на основе железа // *ФММ*. 1984. Т. 58. № 4. С. 716–726.
- [70] *А.Л. Ройтбурд* О некоторых особенностях роста кристаллов в конденсированных системах // *Кристаллография*. 1962. Т. 7. № 8. С. 291–299.
- [71] *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. *Электродинамика сплошных сред*. М.: Наука. 1982. С. 624.
- [72] *А.Л. Ройтбурд* Особенности развития фазовых превращений в кристаллах // *Проблемы современной кристаллографии*. М.: Наука. 1975. С. 345–369.
- [73] *Дж. Хирт, И. Лоте*. *Теория дислокаций*. М.: Атомиздат. 1972. С. 500.
- [74] *А. Коттрел*. *Теория дислокаций*. М.: Мир. 1969. С. 96.
- [75] *Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов*. М.: Металлургия. 1984 // Под ред. М.А. Майерса, Л.Е. Мура. С. 512.
- [76] *E.S. Machlin and M. Cohen* Habit phenomenon in the martensitic transformation // *Trans. AIME*. 1951. V. 191. P. 1019–1029.
- [77] *M.A. Meyers* On the growth of lenticular martensite // *Acta Metall.* 1980. V. 28. P. 757–770.
- [78] *Ф.Л. Локишин* Применение теории ударных волн к описанию процесса роста кристаллов мартенсита // *Научные доклады высшей школы*. М.: Металлургия. 1969. № 1. С. 146–150.

- [79] *C. Crussard* Application de theorie de ondes explosives a la croissance de la martensite // *Compt. Rend.*. V. 240. № 24. P. 2313–2315.
- [80] М.И. Рабинович, Д.И. Трубецков. *Введение в теорию колебаний и волн*. М.: Наука. 1984. С. 432.
- [81] *R.J. Wasilewski* On the nature of the martensitic transformation // *Metall.Trans.*. 1975. V. 6A. P. 1405–1418.
- [82] *U. Kayser* The activation of the martensitic phase transformation in ferrous alloys by stimulated emission of phonons // *J. Phys. F.*. 1972. V. 2. P. 60–64.
- [83] О. Звелто. *Физика лазеров*. М.: Мир. 1979. С. 374.
- [84] *В.Е. Панин, В.Е. Егорушкин, Ю.А. Хон, Т.Ф. Елсукова* Атом-вакансионные состояния в металлах // *Изв. вузов СССР. Сер. Физика*. 1982. № 12. С. 5–28.
- [85] *J. Zhang* The non-equilibrium phase transition theory of martensitic transformation // *J. Phys. F.*. 1984. V. 14. № 3. P. 769–783.
- [86] Дж. Най. *Физические свойства кристаллов*. М.: Мир. 1967. С. 386.
- [87] Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела*. М.: Мир. 1974. С. 472.
- [88] *М.П. Кащенко* Лазерная модель мартенситного превращения в сплавах переходных металлов // *Мартенситные превращения в металлах и сплавах. Доклады Международной конференции „ИСОМАТ-77“*. Киев: Наукова думка. 1979. С. 137–141.
- [89] *М.П. Кащенко, Р.И. Минц* Механизм мартенситного превращения, обусловленный неравновесностью электрон - фононной системы // *Письма в ЖЭТФ*. 1977. Т. 26. № 6. С. 433–435.
- [90] *М.П. Кащенко* Сравнение двух источников неравновесности электронной подсистемы при учете затухания электронов // *Изв. вузов СССР. Сер. Физика*. 1982. № 3. С. 113–114.

- [91] А.М. Афанасьев, Ю.М. Каган Об особенности в законе дисперсии фононов, связанных с электрон - фононным взаимодействием. // ЖЭТФ. 1962. Т. 43. № 10. С. 1457–1463.
- [92] Л.Н. Булаевский Структурный (пайерлсовский) переход в квазиодномерных системах // УФН. 1975. Т. 115. С. 263–300.
- [93] V.E. Egorushkin, S.N. Kulkov and S.E. Kulkova Electronic structure and the theory of phase transformation in NiMn // Physics. 1983. V. 123B. P. 61–68.
- [94] Н.И. Куликов, В.В. Тугушев Волны спиновой плотности и зонный антиферромагнетизм в металлах // УФН. 1984. Т. 144. № 4. С. 643–680.
- [95] Л.П. Горьков Об особенностях электронного спектра соединений со структурой $\beta - W$ // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 20. № 8. С. 571–574.
- [96] Л.П. Горьков, О.Н. Дорохов Сверхпроводящие свойства и структурный переход в соединениях с решеткой А-15 // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 5(11). С. 1934–1950.
- [97] С.В. Вонсовский, Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев. *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*. М.: Наука. 1977. С. 384.
- [98] М. Лэкс. *Флуктуации и когерентные явления*. М.: Мир. 1975. С. 299.
- [99] М.П. Кащенко, Р.И. Минц Колебательные аналоги деформации Бейна и морфология мартенсита в твердых растворах систем γ (Fe-Ni) // ФТТ. 1977. Т. 19. № 2. С. 329–334.
- [100] Г. Эренрейх, Л. Шварц. *Электронная структура сплавов*. М.: Мир. 1976. С. 200.
- [101] А.В. Ведяев Метод когерентного потенциала в теории неупорядоченных сплавов // ТМФ. 1977. Т. 31. № 3. С. 392–404.
- [102] В.Е. Егорушкин, А.И. Кульментьев Электронная структура сплавов переходных металлов с произвольным дальним порядком // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1982. № 12. С. 29–49.

- [103] Д. Каллуэй. *Теория энергетической зонной структуры*. М.: Мир. 1969. С. 360.
- [104] J.C. Slater and G.F. Koster Simplified LCAO method for potential problem // Phys. Rev.. 1954. V. 94. P. 1498–1512.
- [105] Г. Джонс. *Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах*. М.: Мир. 1968. С. 264.
- [106] I.H. Wood Energy bands in iron via the augmented plane wave method // Phys. Rev.. 1962. V. 126. P. 517–527.
- [107] D. Bagayoko and J. Callaway Lattice - parameter dependence of ferromagnetism in BCC and FCC iron // Phys. Rev.B.. 1983. V. 28. P. 5419–5422.
- [108] E.I. Zornberg Band structure and fermi surface of ferromagnetic nickel // Phys. Rev.B.. 1970. V. 1. P. 244–251.
- [109] J.W.D. Connolly Energy bands in ferromagnetic nickel // Phys. Rev.. 1967. V. 159. P. 415–418.
- [110] T. Jarlborg and A.J. Freeman Self-consistent semi-relativistic energy band structure of FCC and tetragonal Ni metals // J. Magn. Magn. Mater. 1980. V. 22. № 1. P. 6–13.
- [111] E.C. Snow and J.T. Waber The APW energy bands of the body centered and face centered cubic modifications of the 3d-transition metals // Acta Metall.. 1969. V. 17. P. 623–635.
- [112] D.M. Roy and D.G. Pettifor Stoner theory support for the two-state hypothesis for iron // J.Phys.F.. 1977. V. 7. P. 183–187.
- [113] Г.В. Самсонов, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко. *Электронная локализация в твердом теле*. М.: Наука. 1976. С. 340.
- [114] А.В. Лякуткин, В.К. Григорович, И.С. Иващенко Исследование фазовых переходов чистого железа методом магнитной восприимчивости // ДАН СССР. 1981. Т. 257. № 2. С. 398–400.
- [115] А.В. Лякуткин Возможность изоморфного охлаждения чистого железа после кристаллизации из расплава // ФММ. 1982. Т. 54. № 1. С. 129–136.

- [116] *M.K. Wilkinson and C.G. Shull* Neutron diffraction studies on iron at high temperatures // *Phys. Rev.*. 1956. V. 103. P. 516–524.
- [117] *P.J. Brown et al.* Ferromagnetic correlations in both the α - and γ -phases of paramagnetic iron // *J. Magn. Magn. Mater.* 1983. V. 30. P. 335–339.
- [118] *В.И. Гребенников, Ю.И. Прокопьев, О.Б. Соколов, Е.А. Туров* Метод локальных флуктуаций в теории магнетизма переходных металлов // *ФММ*. 1981. Т. 52. № 4. С. 679–694.
- [119] *K.J. Tauer and R.J. Weiss* Unusual magnetic structure of face-centered cubic Fe // *Bull. Amer. Phys. Soc.*. 1961. V. 6. P. 125.
- [120] *L. Kaufman, E.V. Clougherty and R.J. Weiss* The lattice stability of metals - III Iron // *Acta Metal.*. 1963. V. 11. P. 323–335.
- [121] *U.K. Poulsen, J. Kollart and O.K. Andersen* Magnetic and cohesive properties from canonical bands // *J. Phys.*. 1976. V. 6. № 9. P. 241–247.
- [122] *J. Kübler* Magnetic moments of ferromagnetic and anti-ferromagnetic bcc and fcc iron // *Phys. Lett.*. 1981. V. 81A. № 1. P. 81–83.
- [123] *Н.И. Куликов* Электронная структура переходных металлов под давлением // *Известия вузов СССР. Физика*. 1982. № 12. С. 50–62.
- [124] *Е.Р. Эйшинский* Два электронных состояния атомов железа в его ГЦК и ОЦК модификациях // *Деп. в ВИНТИ*. 1984. № 1082.
- [125] *J. Keller, J. Fritz and A. Garritz* Cluster method multiple scattering calculation of density of states of liquid transition metals, rare earth metals and their alloys // *J. de Phys.*. 1974. V. 35. № 5. P. 379–385.
- [126] *Е.И. Кондорский. Зонная теория магнетизма. Ч.1*. М.: Изд. МГУ. 1976. С. 136.

- [127] А. Крэкнелл, К. Уонг. *Поверхность Ферми*. М.: Атомиздат. 1978. С. 350.
- [128] М.П. Кащенко Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита систем Fe - Ni, Fe - C в модели фононного лазера // ФММ. 1984. Т. 58. № 5. С. 862–869.
- [129] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко Оптимальная структура зонного спектра электронов в модели фононного лазера // Достижения в области металловедения и термической обработки металлов. Тезисы зональной конференции (9 Ур. школа металловедов - термистов). Свердловск: Институт физики металлов УрО РАН. 1985. С. 93–95.
- [130] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко Принципы отбора пар электронных состояний, потенциально активных в генерации фононов // ФММ. 1986. Т. 61. № 2. С. 237–244.
- [131] Я.И. Ханин. *Квантовая радиофизика. Т.2*. М.: Сов. радио. 1975. С. 496.
- [132] Г. Хакен, В. Вайдлих Квантовая теория лазера // Квантовые флуктуации излучения лазера. М.: Мир. 1974. С. 143–205.
- [133] Г. Хакен. *Синергетика*. М.: Мир. 1980. С. 406.
- [134] Дж. Макомбер. *Динамика спектроскопических переходов*. М.: Мир. 1979. С. 350.
- [135] Г. Хакен Статистика лазерного излучения с точки зрения теории фазовых переходов // Спектроскопия оптического смещения и корреляция фотонов. М.: Мир. 1978. С. 493–517.
- [136] Дж. Такер, В. Рэмpton. *Гиперзвук в физике твердого тела*. М.: Мир. 1975. С. 454.
- [137] *Теплопроводность твердых тел. Справочник*. М.: Энергоатомиздат. 1984. С. 321.
- [138] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*. М.: Наука. 1984. С. 352.
- [139] М.Б. Агранат, С.И. Ашитков, А.Б. Грановский, Г.И. Рукман Взаимодействие пикосекундных лазерных импульсов с

- электронной спиновой и фононной подсистемами никеля // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 4. С. 1376–1379.
- [140] М.П. Кащенко, Р.И. Минц Микроскопический механизм мартенситного превращения в системе Fe-Ni // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 6(12). С. 2280–2289.
- [141] М.П. Кащенко Условия генерации волн, сопоставимых деформации Бейна // ФММ. 1980. Т. 49. № 5. С. 937–946.
- [142] Д.Н. Зубарев. *Неравновесная статистическая термодинамика*. М.: Наука. 1971. С. 416.
- [143] В.П. Калашников. *Метод неравновесного статистического оператора и его приложение к кинетике парамагнитных явлений в проводящих кристаллах*. Дис...докт. ф.-мат. наук. Свердловск: Ин-т физ. мет. УрО РАН. 1971. С. 370.
- [144] Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников Теория возмущений и интегральные уравнения для неравновесных статистических операторов // ТМФ. 1970. Т. 5. № 3. С. 406–416.
- [145] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко Выделение марковского приближения в методе неравновесного статистического оператора // Физические методы исследования твердого тела. Свердловск. 1979. № 3. С. 57–67.
- [146] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко Марковская форма неравновесного статистического оператора для систем со слабым взаимодействием // ТМФ. 1980. Т. 42. № 1. С. 133–138.
- [147] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко. *Построение кинетических уравнений для неравновесных квантовых систем*. Свердловск (Рукопись представлена Урал. лесотехн. ун-том. Деп. ВИНТИ 2 авг. 1979г., № 2893-79). 1979. С. 23.
- [148] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко. *Кинетические уравнения для системы взаимодействующих электронов и фононов*. Свердловск (Рукопись представлена Урал. лесотехн. ин-том. Деп. ВИНТИ 7 дек. 1979г., № 4177-79). 1979. С. 65.
- [149] В.П. Верещагин, М.П. Кащенко. *Пространственно-локальные кинетические уравнения для электронов и*

- фононов. Свердловск (Рукопись представлена Урал. лесотехн. ин-том. Деп. ВИНТИ 5 авг. 1980 г. № 3455-80). 1980. С. 32.
- [150] В.П. Верещагин. *Особенности неравновесной динамики системы взаимодействующих электронов и фононов в твердых телах*. Дисс.... канд. физ. - мак. наук. Свердловск: Уральский политех. институт. 1980. С. 207.
- [151] В.И. Пустовойт Взаимодействие электронных потоков с упругими волнами решетки // УФН. 1969. Т. 97. № 2. С. 257–306.
- [152] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. М.: Наука. 1977. С. 672.
- [153] И.И. Жеру. *Низкочастотные резонансы экситонов и примесных центров*. Кишинев: Штиинца. 1976. С. 196.
- [154] У.Х. Копвиллем, Р.В. Сабурова. *Параэлектрический резонанс*. М.: Наука. 1982. С. 224.
- [155] А.В. Андреев, В.И. Емельянов, Ю.А. Ильинский Коллективное спонтанное излучение (сверхизлучение Дике) // УФН. 1980. Т. 131. № 4. С. 653–694.
- [156] И.Н. Богачев, В.Ф. Егорова. *Структура и свойства железомарганцевых сплавов*. М.: Металлургия. 1973. С. 296.
- [157] П.С. Зырянов, М.И. Клинер. *Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках*. М.: Наука. 1976. С. 480.
- [158] R.J. Weiss and A.S. Marotta Spin-dependence of the resistivity of magnetic metals // J. Phys. Chem. Sol.. 1959. V. 9. P. 302–308.
- [159] С.В. Вонсовский. *Магнетизм*. М.: Наука. 1971. С. 1032.
- [160] М.И. Ауслендер, В.П. Калашников Производящий функционал для неравновесной системы электронов и фононов // ТМФ. 1975. Т. 25. № 3. С. 370–381.
- [161] В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр. *Теория псевдопотенциала*. М.: Мир. 1973. С. 557.

- [162] Д.А. Мирзаев, О.П. Морозов, М.М. Штейнберг О связи превращений в железе и его сплавах // ФММ. 1973. Т. 36. № 3. С. 560–568.
- [163] М.М. Штейнберг, Д.А. Мирзаев, Т.Н. Пономарева Гамма - альфа превращение при охлаждении сплавов железо-марганец // ФММ. 1977. Т. 43. № 1. С. 166–172.
- [164] Д.А. Мирзаев, М.М. Штейнберг, Т.Н. Пономарева, и др. Фазовые $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения в бинарных сплавах железа с медью, кобальтом, рутением и платиной // ФММ. 1981. Т. 51. № 2. С. 364–375.
- [165] Д.А. Мирзаев, М.М. Штейнберг, Т.Н. Пономарева, В.М. Счастливцев Влияние скорости охлаждения на положение мартенситных точек. Углеродистые стали // ФММ. 1981. Т. 47. № 1. С. 125–135.
- [166] Д.А. Мирзаев, М.М. Штейнберг, Т.Н. Пономарева, В.М. Счастливцев Влияние скорости охлаждения на положение мартенситной точки II. Легированные стали // ФММ. 1979. Т. 47. № 5. С. 986–992.
- [167] Д. Гуденаф. *Магнетизм и химическая связь*. М.: Металлургия. 1968. С. 328.
- [168] А.И. Ахизер. *Общая физика. Электрические и магнитные явления: справочное пособие*. Киев: Наукова думка. 1981. С. 472.
- [169] В.М. Бейлин, Т.И. Зейналов, И.Л. Рогельберг Об определении времени электрон-фононной релаксации в никеле и его сплавах // Механизмы релаксационных явлений в твердых телах. Каунас: Каунас. политех. институт. 1974. С. 44–46.
- [170] Н.И. Внуковский. *Излучательные характеристики хромистых сплавов: Автореф. дис.... канд. физ. - мат. наук*. Свердловск: Урал. политех. институт. 1982. С. 24.
- [171] М.М. Носков. *Оптические и магнетооптические свойства металлов*. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1983. С. 220.

- [172] *В.П. Широковский, М.М. Кириллова, Н.А. Шилкова* Аномалия оптического поглощения в железе // *ЖЭТФ*. 1982. Т. 82. № 3. С. 784–792.
- [173] *Г.А. Болотин, М.М. Носков, И.И. Сасовская* Межзонное оптическое поглощение в ферромагнитном кобальте. Связь с плотностью состояний // *ФММ*. 1973. Т. 35. № 4. С. 699–705.
- [174] *L. Kaufman and M. Cohen* The martensitic transformation in the iron-nickel system // *Trans. AIME*. 1956. V. 206. P. 1393–1401.
- [175] *И.И. Сасовская, М.М. Носков, А.З. Меньшиков* Оптические и рентгеновские спектры сплава железа с 30% никеля в ГЦК и ОЦК структурных состояниях // *ФММ*. 1969. Т. 27. № 2. С. 272–279.
- [176] *W. Bendic and W. Pepperhoff* Temperature dependence of the electrical resistivity of fcc iron alloys // *J. Phys. F. Metal. Phys.* 1978. V. 8. № 12. P. 2535–2544.
- [177] *И.Н. Кидин, М.А. Штремель, Ю.Г. Андреев* Электросопротивление углеродистого мартенсита // *ФММ*. 1969. Т. 28. № 5. С. 874–878.
- [178] *Ю.Г. Андреев. Исследование свойств углеродистого мартенсита: Дис.... канд. техн. наук.* М.: МИСИС. 1969. С. 136.
- [179] *И.Б. Кекало. Физические свойства металлов и сплавов.* М.: МИСИС. 1979. С. 106.
- [180] *М.А. Кривоглаз. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах.* Киев: Наукова Думка. 1983. С. 408.
- [181] *Y. Nakamura* The invar problem // *IEEE Trans. Magn.* 1976. V. MAG.-12. P. 278–291.
- [182] *Y. Tanji and Y. Nakamura* Steinemann anomalous elastic properties of Fe-Ni (fcc) alloys and their invar // *Physica*. 1983. V. B 119. P. 109–114.
- [183] *У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел.* Т. 2. М.: Мир. 1983. С. 334.

- [184] Д.С. Каменецкая, И.Б. Пилецкая, В.И. Ширяев. *Железо высокой степени чистоты*. М.: Металлургия. 1978. С. 248.
- [185] Дж. Займан. *Модели беспорядка*. М.: Мир. 1982. С. 592.
- [186] П.В. Гельд, С.П. Довгопол, М.П. Довгопол, И.З. Радовский. Магнитная восприимчивость и структура ближнего порядка железо-углеродистых расплавов // ДАН СССР. 1977. Т. 236. № 4. С. 853–856.
- [187] Д.Ф. Калинович, И.И. Ковенский, М.Д. Смолин. Состояние углерода, растворенного в γ - железе // Изв. АН СССР. Металлы. 1974. № 4. С. 105–107.
- [188] Д.А. Мирзаев, Т.Н. Пономарева, М.М. Штейнберг. О ступенях превращения в сплавах железа, выявляющихся при увеличении скорости охлаждения до $4 \cdot 10^5$ град/сек // Междунар. конф. „Мартенситные превращения“. Тез. докладов. Киев. 16-20 мая 1977. С. 142–143.
- [189] М.П. Кащенко. Согласование концентрационной зависимости температур мартенситных превращений в системах Fe-Ni, Fe-Mn с условиями генерации в модели фононного мазера // ФММ. 1980. Т. 50. № 3. С. 671–672.
- [190] М.П. Кащенко, Е.Р. Эйшинский. Определение оптимальной температуры генерации фононов неравновесными электронами в бинарных сплавах железа // ФММ. 1983. Т. 56. № 4. С. 681–689.
- [191] Е.Р. Эйшинский. *Магнитные и магнитообъемные свойства Fe и Fe-Ni сплавов в модели выделенных состояний атомов железа: Дисс... канд. физ.-мат. наук*. Свердловск: Урал. политехн. ин-т.. 1984. С. 182.
- [192] Дж. Шриффер. *Теория сверхпроводимости*. М.: Наука. 1970. С. 312.
- [193] Ф.И. Федоров. *Теория упругих волн в кристаллах*. М.: Наука. 1965. С. 388.
- [194] И.И. Новиков. *Дефекты кристаллического строения металлов*. М.: Металлургия. 1975. С. 208.

- [195] *A.R. Marder and G. Krauss* The formation of low-carbon martensite in Fe-C alloys // Trans. Quart.. 1969. V. 62. № 4. P. 957–964.
- [196] *В.М. Счастливцев* Структурные особенности мартенсита в конструкционных сталях // ФММ. 1972. Т. 33. № 2. С. 326–334.
- [197] *В.М. Счастливцев* Электронномикроскопическое исследование структуры мартенсита конструкционных сталей // ФММ. 1974. Т. 38. № 4. С. 793–802.
- [198] *В.М. Счастливцев, Н.В. Копцева, Т.В. Артемова* Электронномикроскопическое исследование структуры мартенсита в малоуглеродистых сплавах железа // ФММ. 1976. Т. 41. № 6. С. 1251–1260.
- [199] *В.И. Изотов* Морфология и кристаллогеометрия реечного (массивного) мартенсита // ФММ. 1972. Т. 34. № 1. С. 123–132.
- [200] *В.И. Изотов* Структура закаленной конструкционной стали. Состояние перегрева. // ФММ. 1975. Т. 39. № 4. С. 801–814.
- [201] *Т.В. Этерашвили, М.Н. Спасский, Л.М. Утевский, Г.Н. Туликов* Развитие пластической деформации пакетного мартенсита // ФММ. 1978. Т. 46. № 4. С. 772–780.
- [202] *Т.В. Этерашвили, Л.М. Утевский, М.Н. Спасский* Структура пакетного мартенсита и локализация остаточного аустенита в конструкционных сталях // ФММ. 1979. Т. 48. № 4. С. 807–815.
- [203] *Ю.Г. Андреев, Л.Н. Девченко, Е.В. Шелехов, М.А. Штрель* Упаковка кристаллов мартенсита в псевдомонокристалле // ДАН СССР. 1977. Т. 237. № 3. С. 574–576.
- [204] *Ю.Г. Андреев, Л.Н. Девченко, Е.И. Заркова, М.А. Штрель* Кристаллогеометрия мартенситного сдвига в крупном пакете // ФММ. 1983. Т. 56. № 4. С. 783–790.

- [205] *B.P.I. Sandvic and C.M. Wayman* Electron microscopy studies of lath martensitic // J. Phys. (Fr.). 1982. V. 43. № 12. P. 557–562.
- [206] *А.А. Урусовская* Механические свойства кристаллов // Современная кристаллография. М.: Наука. 1981. Т. 4. С. 47–152.
- [207] *И.Я. Георгиева, И.И. Никитина* Изотермическое и атермическое мартенситные превращения // МиТОМ. 1972. № 5. С. 68–72.
- [208] *А.З. Меньшиков* О влиянии магнитного состояния аустенита на характер мартенситного превращения // ФММ. 1975. Т. 40. № 4. С. 853–856.
- [209] *И.В. Золотаревский, В.Л. Снежной, Л.М. Шейко* О магнитострикции парапроцесса аустенитных сплавов вблизи мартенситной точки // ФММ. 1979. Т. 47. № 6. С. 1312–1313.
- [210] *И.В. Золотаревский, Н.С. Косенко, М.А. Кривоглаз* Влияние магнитострикции на сдвиг точки мартенситного превращения в сильном магнитном поле // Металлофизика. 1979. Т. 1. № 2. С. 17–22.
- [211] *К.П. Белов*. Упругие, тепловые и электрические явления в ферромагнитных металах. М.-Л.: ГИТТЛ. 1951. С. 254.
- [212] *Л.Н. Ромашев* Влияние магнитного состояния γ -фазы сталей на ($\gamma \rightarrow \alpha$) -мартенситное превращение под действием магнитного поля // Фазовые превращения и структура металлов и сплавов. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1982. С. 32–39.
- [213] *И.В. Золотаревский, В.Л. Снежной, И.Я. Георгиева, Л.А. Матюшенко* Магнитострикция аустенита железо- никель - марганцевых сплавов, обладающих двойной кинетикой мартенситных превращений // ФММ. 1981. Т. 51. № 3. С. 669–672.
- [214] *И.В. Золотаревский, В.Л. Снежной, Л.М. Шейко* Магнитострикция аустенита железо- никель - марганцевых сплавов и мартенситное превращение под действием сильного магнитного поля // ФММ. 1983. Т. 55. № 3. С. 548–553.

- [215] Э.А. Завадский, В.И. Вальков. *Магнитные фазовые переходы*. Киев: Наукова Думка. 1980. С. 195.
- [216] *Е.Р. Эйшинский, М.П. Кащенко* Изменение скорости звука за счет перераспределения электронов при магнитном фазовом превращении // ЖТФ. 1981. Т. 51. № 11. С. 2396–2398.
- [217] *Е.Р. Эйшинский, М.П. Кащенко* Механизм изменения скорости звука за счет перераспределения электронов в слабых коллективизированных ферромагнетиках, имеющих пик в плотности состояний d-электронов // Тезисы докл. XV Всесоюзной конф. по физике магнитных явлений. Пермь: УНЦ АН СССР. Ч.1. 1981. С. 34–35.
- [218] *J. Crangle and G.C. Hallam* The magnetization of face centered cubic and body centered cubic iron + nickel alloys // Proc. Roy. Soc.. 1963. V. A. 272. P. 119–132.
- [219] С. Тикадзуми. *Физика ферромагнетизма. Магнитные свойства вещества*. М.: Мир. 1983. С. 302.
- [220] *А.И. Захаров* Влияние температуры на рентгеновский фотоэлектронный спектр валентных электронов сплава Fe-Ni инварного состава // Письма в ЖЭТФ. 1976. Т. 24. С. 276–278.
- [221] *А.И. Захаров, А.Г. Нармонеv* Температурные изменения в рентгеновских фотоэлектронных спектрах валентных и остовных электронов сплава Fe-Ni инварного состава // Металлофизика. 1982. Т. 4. С. 113–115.
- [222] Г. Вертхейм. *Эффект Мессбауэра*. М.: Мир. 1966. С. 172.
- [223] Е.Е. Юрчиков. *Исследование методом ЯГР магнитного и структурного состояния Fe-Ni сплавов: Автореф. дис.... канд. физ.-мат. наук*. Свердловск: Институт физики металлов, УНЦ АН СССР. 1971. С. 19.
- [224] *J. Hesse, J.B. Müller, B. Wiechmann and H. Ullrich* Local Magnetization of Fe atoms in Fe-Ni alloys // J. Magn.Magn.Mater.. 1980. V. 15-18. Part 3. P. 1195–1196.
- [225] *Y. Nakamura* The invar problem // IEEE Trans.Magn.. 1976. V. MAG-12. P. 278–291.

- [226] *H. Hasegawa and J. Kanamori* An application of the coherent potential approximation to ferromagnetic alloys // J. Phys. Soc. Jap.. 1971. V. 31. P. 382–393.
- [227] *А.З. Меньшиков, В.А. Шестаков* Магнитные неоднородности в инварных железоникелевых сплавах // ФММ. 1977. Т. 43. № 4. С. 722–733.
- [228] *В.И. Гоманьков, Б.Н. Мохов, Н.И. Ногин* Концентрационные ферро - антиферромагнитные переходы в системах на основе Fe // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 2(8). С. 630–639.
- [229] *Н.Н. Кузьмин, А.З. Меньшиков* Низкотемпературное критическое рассеяние нейтронов в сплавах железо - никель и никель - марганец // ФММ. 1980. Т. 49. № 2. С. 433–437.
- [230] *С.К. Сидоров, А.В. Дорошенко* О магнитной структуре сплавов Ni Fe, имеющих гранецентрированную кубическую решетку // ФММ. 1965. Т. 19. № 5. С. 786–788.
- [231] *Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев*. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. М.: Наука. 1970. С. 272.
- [232] *Е.И. Кондорский* О причинах особенностей физических свойств инварных сплавов // ЖЭТФ. 1959. Т. 37. С. 1819–1820.
- [233] *M. Hatherly, K. Hirakawa, R.D. Lowde et al.* Spin wave energies and exchange parameters in iron-nickel alloys // Proc. Phys. Soc.. 1964. V. 84. P. 55–62.
- [234] *С.Ф. Дубинин, С.Г. Теплоухов, С.К. Сидоров* Нейтрон - дифракционные эффекты искажений структуры сплава Ni - 67,7 ат. % Fe в магнитоупорядоченном состоянии // ФММ. 1983. Т. 55. № 6. С. 1160–1164.
- [235] *С.Ф. Дубинин, С.Г. Теплоухов, С.К. Сидоров* Уточнение параметров сверхструктуры Fe-Ni инваров // ФММ. 1985. Т. 59. № 6. С. 1158–1164.
- [236] *С.Ф. Дубинин, С.Г. Теплоухов, А.А. Евтух, В.П. Колядин, В.П. Скоробогатов, С.К. Сидоров* Атомная и магнитная сверхструктура остаточного аустенита в сплаве Ni - 66,8 ат. %

- Fe с незавершенным $\gamma-\alpha$ превращением // ФММ. 1985. Т. 59. № 6. С. 1165–1176.
- [237] *S.F. Dubinin, Yu.A. Izyumov, S.K. Sidorov, V.N. Syromyatnikov and S.G. Teplovukhov* The role of the incommensurable atomic structure in the mechanism of the martensite transformation in the invar alloys // Phys.stat. sol. (a). 1981. V. 67. № 1. P. 75–82.
- [238] *С.Ф. Дубинин, С.Г. Теплоухов, Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников, С.К. Сидоров* О симметричной связи фаз при мартенситном превращении инварных Fe-Ni сплавов // ФММ. 1980. Т. 50. № 6. С. 1276–1284.
- [239] *В.В. Бухаленков* Изменение электронной структуры сплавов Fe-Ni с ГЦК - решеткой при магнитном фазовом переходе // ФММ. 1983. Т. 55. № 4. С. 826–829.
- [240] *В.В. Бухаленков. Исследование магнитного и структурного фазовых переходов в Fe-Ni сплавах методом ЯГР: Дисс.... канд. физ.-мат. наук.* Свердловск: Урал. политехн. институт. 1983. С. 144.
- [241] *М.Л. Бернштейн. Термомагнитная обработка стали.* М.: Металлургия. 1968. С. 95.
- [242] *А.С. Ермоленко, А.З. Меньшиков, П.А. Малинен* Возникновение одноосной магнитной анизотропии при мартенситном превращении в магнитном поле // ФММ. 1968. Т. 26. № 1. С. 76–80.
- [243] *Ф. Блатт. Физика электронной проводимости в твердых телах.* М.: Мир. 1971. С. 470.
- [244] *А.А. Леонтьев, В.М. Счастливец, Л.Н. Ромашев* Габитус и ориентация кристаллов мартенсита, образующихся под действием магнитного поля // ФММ. 1984. Т. 58. № 5. С. 950–957.
- [245] *Х. Варлимонт, Л. Дилей. Мартенситные превращения в сплавах на основе меди, серебра и золота.* М.: Наука. 1980. С. 208.
- [246] *М.П. Кащенко* Описание габитусных плоскостей (hh1) в волновых моделях роста мартенсита для сплавов на основе меди,

- золота и железа // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1982. № 3. С. 41–43.
- [247] *М.П. Кащенко* Описание габитусных плоскостей в волновых моделях роста мартенсита. Габитусы (2 2 5), (5 5 7), (9 2 5) // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1982. № 2. С. 7–9.
- [248] *М.Р. Kashchenko* The habit planes (hh1) description in wave models of the martensite growth for Cu-, Au- and Fe-based alloys // Abstract bulletin „ICOMAT-82“, Belgium. 1982. P. 23.
- [249] Дж. Марри. *Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях*. М.: Мир. 1983. С. 400.
- [250] *В.Г. Яхно* Автоволновые процессы в одномерных релаксационных системах // Автоволновые процессы в системах с диффузией. Горький: Институт прикладной физики АН СССР. 1981. С. 46–76.
- [251] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. *Флуктуационная теория фазовых переходов*. М.: Наука. 1982. С. 382.
- [252] В. Миссол. *Поверхностная энергия раздела фаз в металлах*. М.: Металлургия. 1978. С. 176.
- [253] *В.Г. Яхно* О расчете скорости волн в возбудимой среде // Биофизика. 1976. Т. 21. № 3. С. 547–550.
- [254] Р. Гилмор. *Прикладная теория катастроф. Книга 1*. М.: Мир. 1984. С. 352.
- [255] *Б.Я. Любов, А.Л. Ройтбурд* Температурные условия на поверхности растущего мартенситного кристалла // ДАН СССР. 1960. Т. 131. № 4. С. 809–812.
- [256] А.В. Лыков. *Теория теплопроводности*. М.: Высшая школа. 1967. С. 600.
- [257] А.А. Лихачев, Ю.Н. Коваль. *О возможности применения феноменологической теории Ландау для описания мартенситных превращений*. Киев: Институт металлофизики АН УССР. 1983. С. 30.
- [258] *Физическая акустика. Т. 7*. М.: Мир. 1974 // Под ред. У.М. Мэзона. С. 430.

- [259] *В.С. Бобров, М.А. Лебедин* Наблюдение электрических эффектов при низкотемпературном двойниковании ниобия // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 38. № 7. С. 334–336.
- [260] *В.А. Лихачев* Кооперативная пластичность, обусловленная движением границ разориентации и границ раздела фаз // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1982. № 6. С. 83–102.
- [261] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Движение границы мартенситного кристалла как автоволновой процесс // Достижения в области металловедения и термической обработки металлов. Тез. зональной конференции. (IX Уральской школы металловедов - термистов). Пермь: Пермский политехн. институт. 1985. С. 4–5.
- [262] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Движение границы мартенситного кристалла в модели фононного мазера // ФММ. 1985. Т. 60. № 5. С. 855–863.
- [263] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Скорость движения границы мартенситного кристалла в волновых моделях роста // Всесоюзная научная конференция, „Сверхупругость, эффект памяти формы и их применение в новой технике“. Тез. докл. Томск: Изд-во Томск. ун-та. 1985. С. 11–12.
- [264] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Условия стационарного движения границы мартенситного кристалла в модели фононного мазера // Всесоюзная научная конференция, „Сверхупругость, эффект памяти формы и их применение в новой технике“. Тез. докл. Томск: Изд-во Томск. ун-та. 1985. С. 54–55.
- [265] *Д. Пайнс. Элементарные возбуждения в твердых телах.* М.: Мир. 1965. С. 382.
- [266] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Центры зарождения и волновые схемы роста мартенсита в сплавах железа // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1989. № 8. С. 16–20.
- [267] *М.П. Кащенко, В.П. Верещагин* Учет упругого поля прямой молинейной дислокации в рамках волнового описания роста

- мартенсита // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1989. № 8. С. 20–23.
- [268] *В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко* Учет особенностей упругого поля дислокационного центра зарождения в волновой модели роста кристалла α - мартенсита в сплавах железа // Новые методы в физике и механике деформируемого твердого тела. Ч. 1. Томск: Изд-во Томск. ун-та. 1990. С. 136–143.
- [269] *В.П. Верещагин, М.П. Кащенко* Дислокационные центры зарождения α - мартенсита и ориентационные соотношения при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах железа // ФТТ. 1991. Т. 33. № 5. С. 1605–1607.
- [270] *В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко* Дислокационные центры зарождения тонкопластинчатого α - мартенсита в сплавах железа // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1991. № 9. С. 79–83.
- [271] *В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко* Волновая природа зарождения и роста α -мартенсита в сплавах железа // Сильно возбужденные состояния в кристаллах. Сборник трудов Томского ИФПМ. Томск: Изд-во Томск. науч. центра СО АН СССР. 1991. С. 75–89.
- [272] *В.П. Верещагин, М.П. Кащенко* Обобщение волновой модели роста кристаллов α - мартенсита в сплавах железа // Прогнозирование механического поведения материалов. Новгород. 1991. С. 1–5.
- [273] *М.П. Кащенко, В.В. Летучев, С.В. Коновалов, С.В. Нескоромный* Новый подход к направленному формированию структуры α -мартенсита в сплавах на основе железа // Механика прочности материалов с новыми функциональными свойствами. Рубежное. 1990. С. 232–233.
- [274] *М.П. Кащенко, В.В. Летучев, С.В. Коновалов, С.В. Нескоромный* Физическое моделирование процесса зарождения α -мартенсита // ФММ. 1992. Т. 73. № 1. С. 146–147.

- [275] *В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, Т.Ф. Елсукова, А.Г. Иванчин* Структурные уровни деформации твердых тел // Изв. вузов СССР. Сер. Физика. 1982. № 6. С. 5–27.
- [276] *В.Е. Егорушкин, А.И. Кульментьев, В.Е. Панин* К проблеме переменной валентности // ДАН СССР. 1984. Т. 276. № 5. С. 1104–1106.
- [277] *А.В. Ведяев, А.Б. Грановский, Е.И. Кондорский, О.А. Котельникова* К теории кинетических явлений неупорядоченных сплавов в приближении когерентного потенциала // ФТТ. 1978. Т. 20. № 1. С. 166–170.

Эпилог

Автор уверен - читатели, прочитавшие монографию до конца, поняли, что механизм, управляющий непосредственным ростом кристаллов мартенсита (при охлаждении или нагревании) в переходных металлах и сплавах на их основе, в предельном случае сверхзвуковой скорости роста, связан с процессом генерации упругих волн неравновесными 3d-электронами (см. также [1, 2]). Разумеется, содержание монографии не исчерпывается описанием этого процесса, поскольку глубокое понимание физической природы механизма мартенситного превращения в сплавах на основе переходных металлов (в частности, в сплавах на основе железа) нуждается в знании физики твердого тела в полном объеме.

Действительно, специфический процесс первого этапа формирования мартенситного кристалла, в отличие от традиционного зародышеобразования, связан с возникновением возбужденного состояния (в упругом поле дефекта), максимально приспособленного к быстрому росту. Это предполагает знание упругих полей, создаваемых дефектами (главным образом дислокациями) в реальных анизотропных кристаллах.

Необходимо понимать, с одной стороны, особенности энергетической зонной структуры электронов в переходных металлах, а с другой стороны, сущность протекающих в них кинетических явлений, чтобы объяснить механизм генерации волн.

При этом следует принимать во внимание не только чистые металлы, но и сплавы (в широком диапазоне концентраций и температур); не только парамагнитное состояние, но также и ферромагнитное состояние; не только линейные, но также и нелинейные волны с внутренней динамической структурой фронта импульса, и т.д.

Объяснения, вскрывающие физическую сущность основных решенных проблем и акцентирующие отличительную роль мартенситного $\gamma - \alpha$ превращения в сплавах на основе железа среди структурных превращений в твердых телах (как пример перехода со сверхзвуковой скоростью роста), гарантируют ценность данной книги для достаточно широкой аудитории специалистов.

Автор тщательно просмотрел монографию и убедился, что нет необходимости вносить какие-либо обширные изменения в основной текст, сохраняющий в полной мере свою актуальность. Достаточно отметить, например, что анализ влияния углерода на область параметров, в которой выполняются оптимальные условия для генерации управляющих волн, содержится только в данной монографии. Единственный вопрос, требующий уточнения, касается фазировки волн смещений, управляющих ростом кристаллов пакетного мартенсита с габитусами, близкими $\{557\}_{\gamma}$ (см. п. 5.2). Этот вопрос компактно изложен в [3, 4]. Переход к конечным деформациям дает аргументы в пользу принимавшейся ранее фазировки волн в составе управляющего волнового процесса, а именно: волна, бегущая вблизи оси симметрии четвертого порядка $\langle 001 \rangle_{\gamma}$, несет деформацию сжатия, тогда как волна, бегущая вблизи оси симметрии второго порядка $\langle 110 \rangle_{\gamma}$, несет деформацию растяжения. Для бейновской деформации должна реализоваться деформация растяжения и вдоль ортогональной оси симметрии второго порядка $\langle 1\bar{1}0 \rangle_{\gamma}$. Ее появление после потери устойчивости исходной фазы, в конечном счете, обуславливается электронными корреляциями, восстанавливающими симметрию новой более устойчивой фазы.

Естественно, при подготовке второго издания монографии были устранены замеченные опечатки.

Следует подчеркнуть, что в течение времени, прошедшего после выхода первого издания монографии, получены существенные результаты в направлениях исследования, отмеченных в качестве перспективных в заключительной части основного текста. Перечислим кратко важнейшие из них.

1. Дислокационные центры зарождения были установлены для мартенситных кристаллов со всеми типами габитусных плоскостей [5]. Это позволило интерпретировать и процессы формирования типичных ансамблей мартенситных кристаллов (см., например, [6–9]).
2. Для описания формирования тонкой структуры двойников превращения были предложены модели (см. [10–14]) скоординированного распространения относительно коротких и относительно длинных волн атомных смещений.
3. Вычисления для дислокационных петель показали, что их упругие поля (обладающие большей неоднородностью по сравнению с полями бесконечных прямолинейных дислокаций) создают такие компактные области, образование начальных возбужденных состояний в пределах которых ведет к наблюдаемым распределениям ориентировок габитусных плоскостей. Следовательно, распределение габитусных плоскостей дает дополнительную информацию для реконструкции процесса образования начального возбужденного состояния по наблюдаемым морфологическим признакам [15–17].
4. Для описания аккомодационных процессов в решетке, потерявшей устойчивость в ходе распространения управляющего волнового процесса, удобным и конструктивным оказалось использование кристонов - носителей деформации сдвига супердислокационного типа с распределенным в объеме полем смещений [9]. Первоначально это понятие было введено для интерпретации формирования полос сдвига с ориентациями границ, отличающимися от плоскостей легкого скольжения (см., например, [18–22]).
5. Кристонная модель адекватно отражает и процесс распространения пороговой деформации при формировании кристаллов мартенсита деформации (см. [23–25]).
6. Построение микроскопической теории генерации упругих волн

неравновесными d - электронами в сплавах переходных металлов с моделированием конечной деформации межфазной области, существенно превышающей пороговые значения [26–28].

Подводя предварительный итог, отметим, что сложилось достаточно ясное понимание физических механизмов для наблюдаемых вариантов $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в сплавах на основе железа. Существенно, что концепции гетерогенного зарождения и деформации, управляющей ростом кристалла (последняя локализована в межфазной области - фронте нелинейной волны превращения), являются универсальными для описания формирования мартенситного кристалла. Однако динамический характер управления процессами, так же как и механизмами их энергетической поддержки, существенно различаются. Для случая мартенсита охлаждения - это волновой процесс управления, который поддерживается в мазерном режиме неравновесными электронами на стадии роста. Для случая мартенсита деформации (при невысоких скоростях деформаций) - это процессы распространения кристонов, поддерживаемые, в основном, энергией внешних напряжений. Заметим, что, за исключением ссылок на работы [4, 26–28], изложенный выше материал отражен в английском переводе монографии [29], легко доступном в Интернете.

Однако этими результатами не исчерпывается достигнутый прогресс. Современное состояние динамической теории МП в массивных образцах (крупных зернах) можно характеризовать как определенный завершающий этап кристаллодинамического описания зарождения и быстрого роста кристаллов при реконструктивных мартенситных превращениях.

Действительно, для перехода от пороговых (порядка $10^{-4} \div 10^{-3}$) к финишным (порядка 0,1) деформациям ключевые положения динамического анализа самоорганизующейся мартенситной реакции были дополнены простым, но крайне важным условием. А именно: высокая скорость превращения и его динамический характер приводят к тому, что потерявшая устойчивость пластинооб-

разная область решетки, стремясь в стесненных условиях к новой симметрии расположения атомов, сохраняет неизменным отношение главных деформаций, заданное управляющим волновым процессом (УВП).

Использование этого условия позволило описать все морфологические признаки, включая параметр решетки a и относительное изменение объема при ОЦК – ГПУ МП, как функции упругих свойств исходной фазы [30–33]. Уже упомянутые выше работы [3, 4] также учитывают условие неизменности отношения главных деформаций, задаваемого УВП. В результате, управляющий волновой процесс, обеспечивая наибо́льшие пути мартенситной перестройки, предопределяет макроскопические морфологические признаки, охватывая по глубине управления несколько порядков по деформации. Эти результаты позволили окончательно подтвердить справедливость волновой модели управления ростом мартенситного кристалла, продемонстрировав, что не только габитусные плоскости, но и все остальные характерные морфологические признаки выражаются через один универсальный параметр – отношение скоростей упругих волн исходной фазы.

Успешное описание перехода от пороговых к финишным деформациям было достигнуто и для наиболее сложного случая формирования мартенситных кристаллов с регулярной структурой двойников превращения. Этот вопрос детально изложен в компактной монографии [34], где на основе концепции УВП, включающего коротковолновые и длинноволновые компоненты, проводится анализ моделей [10–14] и для $\gamma - \alpha$ МП предпочтение отдается варианту [14] (см. также [35, 36]), требующему на начальном этапе существования только одной возбужденной коротковолновой ячейки. Более того, формирование двойникованных кристаллов можно рассматривать как частный случай образования регулярных слоистых структур при распространении УВП в метастабильном аустените.

Существенное развитие получила и модель зарождения мартенситного кристалла в поле отдельной дислокации. Удалось привести ясные аргументы для уточнения минимального допустимого рас-

стояния от линии дислокации до области локализации начального возбужденного состояния. Заметим, что в [1] указанное расстояние оставалось недоопределенным. Это позволило дать очевидную оценку соотношения пространственных масштабов: толщина тонкопластинчатого мартенситного кристалла (или толщина мидриба линзовидных кристаллов) составляет приблизительно сотую долю от среднего междислокационного расстояния или, в важном частном случае, от диаметра зерна [37].

Соотношение пространственных масштабов, дополненное, в свою очередь, требованием выполнения оптимальных условий для генерации управляющих волн неравновесными электронами (подробно обсуждаемом в гл. 4 монографии) позволило вывести формулы [38–41] для зависимости температуры M_S начала МП от размера зерна D и для критического размера зерна D_c . Формула для D_c содержит такие значимые параметры, как скорость s -электронов и их безразмерное затухание Γ' , учитывающее, главным образом, вклад примесного рассеяния, зависящего от концентрации второго компонента и разности зарядовых чисел ионизированных атомов матрицы и второго компонента сплава, а также средний энергетический интервал вблизи энергии Ферми, существенный для коллектива d-электронов, способных участвовать в генерации управляющих волн. В частности, формула для D_c объясняет возможность предельного перехода $D_c \rightarrow \infty$ при $M_S \rightarrow 0$ К для критической концентрации второго компонента сплава, соответствующей условию $\Gamma' \rightarrow 1$. Таким образом, решена еще одна фундаментальная проблема, возникшая после экспериментального обнаружения критического размера зерна [42]. Одновременно с установлением на плоскости изменения параметров Γ' и T' области значений, оптимальной для генерации неравновесными d-электронами волн, управляющих ростом мартенситного кристалла, найдена и область $\Gamma' > 1$, в которой невозможна реализация МП за счет распространяющегося волнового процесса, поддерживаемого d-электронами. Температура, оптимальная для генерации волн, управляющих ростом кристаллов, естественно сопоставляется с температурой начала мартенситного превращения M_S .

Соотношение пространственных масштабов, характерное для начальной стадии мартенситной реакции, и существование критического размера свободного от дефектов объема для протекания МП (в частности, критического размера зерна), открывают принципиальную возможность описания важного макропараметра - доли превратившегося аустенита. Наиболее наглядно это можно пояснить для случая автокаталитической макрокинетики, когда значимая доля (порядка 10%) образуется в течение одного „взрыва“. Действительно, кристаллы мартенсита, по мере появления, уменьшают размеры областей со свободными объемами непревратившегося аустенита, обрамленными границами мартенситных кристаллов и зерен. Но тогда должны уменьшаться и толщины вновь образующихся кристаллов. Это означает, что соотношение пространственных масштабов позволяет задать коэффициент подобия при образовании кристаллов новых поколений. Последнее поколение соответствует достижению критического размера (порядка D_c) для свободных объемов аустенита. Таким образом, соотношение пространственных масштабов становится ключевым параметром для реализации динамики фрактального типа при оценке долей превращенного и остаточного аустенита [43, 44]. Принципиально важно, что расчет макропараметра осуществляется без привлечения термодинамики на основе чисто динамического подхода. В свою очередь, знание изменяющихся масштабов свободного объема и зависимости M_S от размера зерна позволяют объяснить необходимость понижения температуры старта мартенситной реакции в присутствии ранее возникших кристаллов. Температуру M_f окончания мартенситной реакции для сплава заданного состава можно интерпретировать тогда, как температуру M_S для образования кристаллов последнего поколения.

На рис. 1 в схематической форме представлена логическая структура динамического подхода к описанию мартенситных превращений. Бездиффузионные спонтанные (при охлаждении) фазовые структурные превращения в отдельных малых частицах и в зернах поликристаллов, имеющих размер меньше критического, требуют отдельного анализа. Например, в нанокристаллическом



Рис. 1. Узловые моменты описания мартенситной реакции в моно- и поликристаллических материалах с размерами зерен, превышающими критический размер D_c

состоянии (при диаметре зерен $\leq 100\text{нм}$) мартенситное превращение или полностью подавляется (как это имеет место в сплавах Fe-Ni) или модифицируется (как в сплавах никелида титана, для которых пороговые деформации существенно ниже, чем в сплавах Fe – Ni), утрачивая такую характеристику, как габитус, входящую в неотъемлемый набор морфологических признаков мартенсита монокристаллов и зерен с закритическим ($D > D_c$) размером. Типично двойникование упорядоченной кристаллической

структуры центральных областей нанозерен. Очевидно, что роль самых длинноволновых смещений теперь переходит к собственным колебаниям зерен и максимальная длина волны ограничена снизу величиной удвоенного диаметра зерна. В цепочках мелких (≤ 10 нм) контактирующих зерен в принципе возможна реакция превращения зерен как целого, сопровождающаяся эстафетной передачей деформации от зерна к зерну. В [45] при качественном анализе возможностей мартенситного превращения в нанокристаллическом состоянии оно названо «аккомодационным». Имеется в виду, как внутренняя двойниковая аккомодация, так и упомянутая межзеренная эстафетная аккомодация. В табл. 1, взятой из [45], приводится характерная иерархия пространственных масштабов. Видно, что по мере уменьшения критических размеров структуры роль „длинноволнового“ смещения переходит к смещениям, игравшим роль „коротковолновых“ на предшествующем масштабном уровне, что отражает существующее подобие в динамике мартенситной реакции.

Таблица 1. Иерархия типичных критических размеров зерна D_c , толщин мартенситных кристаллов d и толщин двойников d_{tw}

Тип мартенсита	D_c	d	d_{tw}
Мартенсит охлаждения и напряжения	1 мкм	$10 \div 100$ нм	$3 \div 10$ нм
Мартенсит деформации	0,1 мкм	$1 \div 10$ нм	
Мартенсит аккомодационный двойникованный	$20 \div 100$ нм	$20 \div 100$ нм	$1 \div 3$ нм
Мартенсит аккомодационный одной ориентировки. Превращение зерна как целого	$3 \div 10$ нм	$3 \div 10$ нм	

Резюме

Подводя окончательные итоги, можно констатировать, что в настоящее время модель формирования кристалла мартенсита (включая стадии гетерогенного зарождения, волнового роста и аккомодации сосуществующих фаз) для спонтанного (в процессе охлаждения) $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения в сплавах железа,

реализующегося в монокристаллах или поликристаллах с размерами зерен $D > D_c$, в целом завершена. Высокая степень полноты описания наблюдаемых особенностей превращения позволяет говорить о создании динамической теории спонтанного $\gamma - \alpha$ МП. Этот вывод можно отнести и к динамической теории формирования мартенсита напряжения (при охлаждении во внешнем упругом поле), для которого, по сравнению со спонтанным превращением, просто сокращается число реализуемых вариантов ориентаций мартенситных кристаллов.

Адекватность развитой теории физической природе механизма МП, по мнению автора, не вызывает сомнений. Это открывает широкое поле деятельности для использования богатого арсенала физической акустики при анализе особенностей морфологии отдельных кристаллов (пластинчатая и клиновидная формы), их стыков (остро- и тупоугольных), взаимных пересечений, взаимодействий с границами зерен на базе представлений об УВП, как суперпозиции волновых пучков, распространяющихся в метастабильном аустените и способных нарушать его устойчивость. Касаясь других перспективных направлений исследований, отметим, прежде всего, возможность расширения сферы приложения теории к переходам типа ОЦК-ГПУ и обратного ГПУ- ОЦК, требующим дополнительной коротковолновой перетасовки плоскостей, не сказывающейся на макроскопических морфологических признаках, а также к переходам первого рода, близким к переходам второго рода (например, в сплавах на основе никелида титана).

Несомненный интерес представляет и уточнение динамического описания аккомодационного МП в нанокристаллическом состоянии.

Список литературы к эпилогу

- [1] Кащенко М. П., Летучев В.В., Коновалов С.В., Нескоромный С.В. Волновой механизм роста и новая методика инициирования зарождения α -мартенсита *ФММ*, 76(3):90-101, 1993.
- [2] Letuchev V.V., Konovalov S.V., Kashchenko M.P. Dynamical Lattice State at the Initial Stage of Martensitic Transformation and Possibilities of its Physical Realization. *Journal de Physique IV, Colloque C2*, Vol.5, P.53-58, 1995.
- [3] Чащина В.Г. Формирование кристаллов α - мартенсита с габитусами {557}. В кн.: *V Международная научная конференция „Прочность и разрушение материалов и конструкций“: Материалы конференции -Т.2, 12-14 марта 2008 г.- Оренбург, Россия/ Науч. ред. – С.Н. Летута, Г.В. Клевцов: ИПК ГОУ ОГУ*, 2008, с. 250-253.
- [4] Чащина В.Г. Мартенситное превращение при наибоыстрейшей перестройке $\{110\}_\gamma$ плоскостей *Известия вузов. Физика*, 7, с. 95-98, 2009.
- [5] Letuchev V.V., Vereshchagin V.P., Alexina I.V., Kashchenko M.P. Conception of New Phase Dislocation-Based Nucleation at Reconstructive Martensitic Transformations. *Journal de Physique IV, Colloque C8*, Vol.5, P.151-156, 1995.
- [6] Кащенко М.П., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Дислокационные центры зарождения α - мартенсита и парные сочленения кристаллов тонкопластинчатого мартенсита. *Известия вузов, сер. Физика*, 37(6):64-67, 1994.

- [7] Кащенко М.П., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Дислокационные центры зарождения α - мартенсита и парные сочленения кристаллов мартенсита с габитусами {hhl}. *Известия вузов, сер. Физика*, 37(4):67-70, 1994.
- [8] Верещагин В.П., Кащенко М.П., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Идентификация дефектов, необходимых для реализации многокристалльных группировок пакетного мартенсита. *ФММ*, 77(4):173-174, 1994.
- [9] Кащенко М. П., Летучев В.В., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Модель формирования пакетного мартенсита, *ФММ* 83(3):43-52, 1997.
- [10] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамический механизм двойникования мартенситного кристалла. *Механизмы деформации и разрушения перспективных материалов, Сб. трудов XXXV семинара „Актуальные проблемы прочности“, ППИ СПбГТУ, Псков*, с.14-19, 1999
- [11] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Влияние неоднородности фронта управляющего волнового процесса на распределение двойников превращения в кристаллах мартенсита с габитусами типа (2 5 9) – (3 10 15). *Физика процессов деформации и разрушения и прогнозирование механического поведения материалов: труды XXXVI международного семинара „Актуальные проблемы прочности в 2 частях“. Ч.I, Витебск, ВГТУ*, с.81-86, 2000.
- [12] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Влияние неоднородности фронта управляющего волнового процесса на распределение двойников превращения в кристаллах мартенсита с габитусами типа (225). *Научные труды IV международного семинара „Актуальные проблемы прочности в 2 т.“, т.I, Великий Новгород, НГУ*, с.156-158, 2000.

- [13] Чащина В.Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига. *Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург, 2000, 139с.*
- [14] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Вихарев С.В., Иванов С.В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов при мартенситных превращениях. *XVII Петербургские чтения по проблемам прочности, Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. Ч. II. - Спб., с. 278-280, 2007.*
- [15] Кащенко М.П., Нефедов А.В., Верещагин В.П., Летучев В.В. Зарождение кристаллов α – мартенсита с габитусами (hhl) в упругих полях дислокационных петель. *ФММ*, 85(4):25-39, 1998.
- [16] Джемилев К.Н., Нефедов А.В., Кащенко М.П. Влияние точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения мартенсита. *Физика процессов деформации и разрушения и прогнозирование механического поведения материалов: труды XXXVI международного семинара „Актуальные проблемы прочности в 2 частях“. Ч. II, Витебск, ВГТУ, с.506-511, 2000.*
- [17] Джемилев К.Н., Нефедов А.В., Кащенко М.П. Влияние точечных дефектов на упругие поля призматических дислокационных петель. *Научные труды IV международного семинара „Актуальные проблемы прочности в 2 т. Т. I“, Великий Новгород, НГУ, с.195-199, 2000.*
- [18] Кащенко М.П., Летучев В.В., Теплякова Л. А., Яблонская Т.Н. Модель образования полос макросдвига и мартенсита деформации с границами (h h l), *ФММ*, 82(4):10-21, 1996.
- [19] Кащенко М.П., Теплякова Л.А., Соколова О.А., Коновалов С.В. Формирование плоских полос сдвига с границами {123} в ГЦК монокристаллах. *ФММ*, 86(1):43-47, 1998.

- [20] Кащенко М.П., Теплякова Л.А., Джемилев К.Н., Чащина В.Г. Условия генерации кристонов и интерпретация кривой $\sigma - \varepsilon$ для монокристаллов Ni_3Fe . *ФММ*, 88(3):17-21, 1999.
- [21] Kashchenko M.P., Chashchina V.G., Semenovih A.G. The mechanism of formation of the shear bands with orientations of boundaries $\{h h l\}$ in cubic crystals. *Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage. Proceedings of EUROMAT 2000, V.I., Amsterdam: Elsevier science Ltd.*, p. 305-310, 2000.
- [22] Кащенко М.П., Чащина В.Г., Семеновых А.Г. Кристонная модель формирования полос сдвига в кубических кристаллах с кристаллографической ориентировкой границ общего типа. *Физическая мезомеханика*, 6(1):95-122, 2003.
- [23] Кащенко М. П., Семеновых А.Г., Чащина В.Г. Кристонный механизм формирования α' мартенсита деформации в присутствии мартенсита напряжения. *Вопросы материаловедения*, 1(29):253-259, 2002.
- [24] Кащенко М. П., Чащина В.Г., Семеновых А.Г. Кристонная модель формирования α' мартенсита деформации в сплавах на основе железа. *Физическая мезомеханика*, 6(3):95-122, 2003.
- [25] Kashchenko M.P., Semenovih A.G. and Chashchina V.G. Cryston model of α strain induced martensite. *J. Phys. IV France* №112, p. 147-150, 2003.
- [26] Kashchenko M., Skorikova N., Chashchina V. Influence of the finite deformations changing the symmetry of an initial lattice on a generation of atoms displacements waves by non-equilibrium electrons. *arXiv: cond-mat/0605167v1*, 2006.
- [27] Kashchenko M.P., Skorikova N.A., Chashchina V.G. Ab initio analysis of the Effect of Strain on the density of non-equilibrium electronic states and their role in the wave model of martensitic transformations. *Materials Science and Engineering: A*, doi: 10.1016/j.msea, 2006.12.228

- [28] Скорикова Н.А. Влияние деформации, нарушающей симметрию исходной решетки, на условие генерации волн смещений атомов неравновесными электронами. *Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург*, 2006. 129с.
- [29] Kashchenko M.P. The wave model of martensite growth for the FCC-BCC transformation of iron-based alloys. *arXiv: cond-mat/0601569 v3 4 Feb*, 2006.
- [30] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 3(4):67-70, 2006.
- [31] Kashchenko M.P., Chashchina V.G. The material orientation relationship for the bcc-hcp transformation. *arXiv: 0707.1938 v 1 [cond-mat. mtrl-sci] 13 Jul*, 2007.
- [32] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Управляющий волновой процесс и материальные ориентационные соотношения при реконструктивных мартенситных превращениях. *XLVI Международная конференции „Актуальные проблемы прочности“, 15-17 октября 2007 г., Витебск, Беларусь: материалы конференции. Ч.2./ УО „ВГТУ“.-Витебск*, с. 99-104, 2007.
- [33] Чащина В.Г. Зависимость относительного изменения объема при ОЦК-ГПУ мартенситном превращении от упругих свойств исходной фазы. *XIX Уральская школа металлосоведов – термистов: „Актуальные проблемы физического металлосоведения сталей и сплавов“, посвященная 100-летию со дня рождения академика В.Д. Садовского. Екатеринбург, 4-8 февраля 2008г.: сборник материалов, Екатеринбург: УГТУ-УПИ*, с. 152, 2008.
- [34] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах железа *Урал. гос. лесотехн. ун – т. Екатеринбург*, 2009, 98 с.

- [35] Кащенко М.П., Чащина В.Г., Вихарев С.В. Кристаллодинамическая модель отбора ориентации границ двойниковой структуры при формировании мартенситного кристалла *Известия вузов. Физика*, 8, с. 94-95, 2009.
- [36] Кащенко М.П., Чащина В.Г., Вихарев С.В. Соотношение компонентов слоистой структуры, формируемой управляющим волновым процессом в метастабильно устойчивом аустените *Известия вузов. Физика*, 9, с. 96-97, 2009.
- [37] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Соотношение пространственных масштабов при зарождении мартенсита в упругом поле дислокации. В кн.: *V Международная научная конференция „Прочность и разрушение материалов и конструкций“: Материалы конференции. -Т.2, 12-14 марта 2008 г.- Оренбург, Россия/ Науч. ред. – С.Н. Летута, Г. В. Клевцов: ИПК ГОУ ОГУ*, с. 242-249, 2008.
- [38] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Критический размер зерна при зарождении кристалла мартенсита в упругом поле дислокации. *XIX Уральская школа металловедов – термистов: „Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов“, посвященная 100-летию со дня рождения академика В.Д. Садовского. Екатеринбург, 4-8 февраля 2008г.: сборник материалов, Екатеринбург: УГТУ-УПИ*, с. 42, 2008.
- [39] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Зависимость температуры начала мартенситного превращения от размера зерна *XLVII Международная конференция: „Актуальные проблемы прочности“, 1-5 июля 2008 года Нижний Новгород, Нижний Новгород: материалы конференции. Ч.1. - Н.Новгород*, с. 237 – 239, 2008.
- [40] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Проблема критического размера зерна при $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении. Термодинамический анализ с учетом пространственных масштабов, характерных для стадии зарождения мартенсита. *Физическая мезомеханика*, 13(1):29 – 35, 2010.

- [41] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Зависимость температуры начала $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения от размера зерна. *Физическая мезомеханика*, 13(1):37 – 45, 2010.
- [42] Scheil E. Über die Umwandlung des Austenit in geharten Stahle. *Z. anorg. Chem.*, 1929, 180, S. 1-6.
- [43] Чащина В.Г., Федоровских Е.С., Кащенко М.П. Размер критического свободного объема для начала спонтанного $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения. II. Расчет температуры M_f . *X Международная научно-техническая Уральская школа-семинар: „ГОУ ВПО УГТУ-УПИ“, 2009 года, Екатеринбург*, с. 147 – 149, 2009.
- [44] Чащина В.Г., Федоровских Е.С., Кащенко М.П. Размер критического свободного объема для начала спонтанного $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения. I. Алгоритм расчета доли превращенного аустенита. *X Международная научно-техническая Уральская школа-семинар: „ГОУ ВПО УГТУ-УПИ“, 2009 года, Екатеринбург*, с. 150 – 152, 2009.
- [45] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Аккомодационное мартенситное превращение в нанокристаллическом состоянии *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 5(2), с. 40-44, 2008.

Summary

Kashchenko M.P. „The wave model of martensite growth for the $\gamma - \alpha$ transformation of iron-based alloys.“

Kashchenko Mikhail Petrovich, professor (Holder of Physics Chair, Urals State Forest Engineering University), doctor of physical-mathematical sciences. The sphere of his scientific interests: physics of solids, high-excited states of solids, martensitic transformations, synergetics.

This book is the first monograph in the scientific literature, dedicated to the $\gamma - \alpha$ transformation in iron-based alloys, in which the dynamical approach is used for the explanation of the martensite growth stage.

The rapid growth of a martensite crystal is considered as a self-organized process controlled by the quasi-longitudinal lattice displacement waves (DW). The regime of the DW initial excitation is rigid. DW have the frequencies $\sim 10^{10} s^{-1}$ from the hypersound band and the amplitudes providing the level of deformation $\sim 10^{-3}$. The conditions that are necessary for the generation of DW by non-equilibrium d-electrons are analyzed.

A wide range of questions (from peculiarities of the electronic spectrum to macroscopic morphological indicators), connected with the physical interpretation of the $\gamma - \alpha$ martensitic transformation in iron-based alloys, is discussed.

The short review of results having fundamental meaning for the creation of a physical model describing the martensite nucleation process are given in the monograph's conclusion and epilogue. It is shown, that processes of the heterogeneous nucleation and wave growth have the genetic connection to the $\gamma - \alpha$ martensitic transformation.

Кащенко Михаил Петрович

ВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ РОСТА МАРТЕНСИТА ПРИ $\gamma - \alpha$ ПРЕВРАЩЕНИИ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Дизайнер А. А. Гурьянова

Авторская редакция

Подписано в печать 19.05.2010. Формат $60 \times 84^{1/16}$.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 16,28. Уч. изд. л. 17,42.

Гарнитура Computer Modern Roman. Бумага офсетная №1. Заказ №32.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

<http://shop.rcd.ru> E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: (+73412) 500-295
